ÜBER DEN FUNKTIONALRAUM DES HARMONISCHEN OSZILLATORS

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften

dem Fachbereich Physik der
Eberhard-Karls-Universität
zu Tübingen
vorgelegt von

REINHARD WEBER
aus Berlin

1970

Tag der mündlichen Prüfung:	12. 2. 1970
Dekan:	Privatdozent Dr. Schief
1. Berichterstatter:	Prof. Dr. H. Stumpf
2. Berichterstatter:	Prof. Dr. H. Mitter

Inhalt
=====

		Seite
Einführung		2
Kap. 1	Funktionale Formulierung der Wickregel	5
1.1	Quantenmechanische Behandlung des H.O.	5
1.2	Mehrzeitige Operatorprodukte	7
1.3	Zweierprodukte und Kontraktionen	9
1.4	Das Wicksche Theorem	12
Kap. 2	Berechnung der Eigenfunktionale des H.O.	16
2.1	Matrixelemente von operatorwertigen Funktionalen	16
2.2	Energieeigenfunktionale des H.O.	20
2.3	Besondere Eigenschaften der Eigenfunktionale	25
Kap. 3	Funktionalgleichung beim H.O.	31
3.1	Zur Aufstellung von Funktionalgleichungen	31
3.2	Zur Lösung der Funktionalgleichungen	37
3.3	Symmetrisierung der Funktionalgleichungen	45
Kap. 4	Funktionalnorm beim H.O.	50
4.1	Skalarprodukt im Funktionalraum	50
4.2	Spezielles Skalarprodukt beim H.O.	55
4.3	Entwicklung nach Funktionalsystemen	61
Zusammenfassung und Ausblick		67
Literaturverzeichnis		69

Einführung

UNIV. LEIDEN BIBL.

Auf dem Gebiet der Elementarteilchenphysik gibt es bis jetzt zwar viele Theorien und Rechnungen, die einzelne Eigenschaften der Elementarteilchen innerhalb der Beobachtungsgrenzen ganz gut wiedergeben. Man ist sich auch darüber einig, daß Feldtheorien der einzig passende Rahmen für die Beschreibung von Elementarteilchen sind. Doch scheint es nahezu unmöglich, die vorhandenen Modelle zu einer umfassenden Theorie zu vereinigen. Es gibt nun allerdings Ansätze zu einer einheitlichen Theorie der Elementarteilchen, doch ist es noch umstritten, ob die Nichtlineare Spinortheorie mit nichtkanonischer Quantisierung, wie sie HEISENBERG [8] und DÜRR [5] vorgeschlagen haben, die Dynamik aller Teilchen enthält. Die Zweifel können erst dann behoben werden, wenn es gelingt, mit Hilfe dieser Theorie konsistent und deduktiv mehr als nur die niedersten (und fast trivialen) Näherungen zu berechnen. In der Nichtlinearen Spinortheorie von HEISENBERG [8] wird das dynamische Verhalten von Elementarteilchen durch Funktionale der Feldoperatoren in Heisenberg-Darstellung und zugehörige Funktionalgleichungen beschrieben (vgl. auch RAMPACHER/STUMPF/WAGNER [13]). Die dabei verwendeten Funktionale hat zuerst SCHWINGER [19] in die Feldtheorie eingeführt und später SYMANZIK [27] weiter behandelt. Den erwähnten Funktionalgleichungen entsprechen im Konfigurationsraum unendliche Systeme von Differential- und Integralgleichungen zwischen den Matrixelementen der Feldoperatoren. Diese Formulierung ist deshalb so besonders geeignet, weil sie sowohl für die kanonische als auch die Heisenbergsche nichtkanonische Quantisierung gilt, wo die übliche Schrödingertheorie nicht mehr

zu gebrauchen ist. Das Hauptproblem besteht dann darin, systematische Lösungsmethoden für die Funktionalgleichungen zu finden.
Um den Vorschlag von Heisenberg an bekannten Beispielen zu testen und Lösungstheorien zu entwickeln, haben STUMPF und Mitarbeiter [10, 17, 18] den Funktionalkalkül zunächst in der Quantenmechanik und zwar am konkreten Fall des Anharmonischen Oszillators behandelt, so daß man die Ergebnisse unmittelbar mit der Schrödingertheorie vergleichen kann. Die Quantenmechanik soll ja in der allgemeinen Theorie mitenthalten sein, für die spätere Anwendung auf die Spinortheorie stellt sich eine Orts-Impuls-(p-q-)-Darstellung als sehr günstig heraus. MITTER [11 a, b] hat die funktionale Methode in etwas verschiedener Weise direkt auf die Nichtlineare Spinortheorie angewendet.
Wenn es nach diesen Bemerkungen noch einer Rechtfertigung bedarf, warum wir in unserer Arbeit den Harmonischen Oszillator als Testmodell gewählt haben, obwohl er hinlänglich bekannt ist, so wollen wir zwei Punkte hervorheben:

1) Der Harmonische Oszillator ist das einfachste quantenmechanische System, das man ohne Näherungen explizit angeben kann, so daß auch eine direkte Berechnung aller funktionalen Größen möglich wird.

2) Der Harmonische Oszillator hat in der Feldtheorie das freie Bosonfeld als Analogon. Er erlaubt daher einen einfachen Zugang zur Streutheorie, insbesondere zur funktionalen Fassung der Streumatrix.

Anmerkungen zum Inhalt:
Eine funktionale Formulierung der Wickregel für freie Felder wurde bereits von BEREZIN [1] gegeben, so daß sie beim Harmonischen Oszillator übertragen werden kann. Jedoch ist es uns in Kap. 1 darum zu tun, den Beweis für die funktionale Fassung ohne Axiome aus der Feldtheorie zu bringen, derart daß alles aus den bekannten Lösungen der Schrödingertheorie

aufgebaut wird. Zudem können wir hier die von STUMPF und Mitarbeitern benutzte Nomenklatur, deren wir uns durchweg in dieser Arbeit bedienen, ganz anschaulich einführen.
Jedem Abschnitt ist zur leichten Orientierung eine kurze Inhaltsangabe vorausgeschickt.

Kapitel 1

Funktionale Formulierung der Wick-Regel

1.1 Quantenmechanische Behandlung des Harmonischen Oszillators

Der eindimensionale Harmonische Oszillator (in dieser Arbeit durchweg mit H.O. abgekürzt) ist ein bekanntes quantenmechanisches (q.m.) System, weil es sich im "Bracket"-Formalismus von DIRAC [4] sehr elegant darstellen und lösen läßt. Wir können uns daher auf die Angabe der später benötigten Ergebnisse beschränken und im übrigen auf eines der zahlreichen Quantenmechanik-Lehrbücher verweisen.
Wählt man die Maßeinheiten derart, daß $m = \hbar = 1$ wird, dann lautet der Hamiltonoperator des H.O.

$$\mathcal{H}(q,p) = \tfrac{1}{2}(p^2+\omega^2 q^2) \tag{1.1}$$

mit der kanonischen Quantisierungsvorschrift

$$[q,p]_- = i\,1 \tag{1.2}$$

Die stationären Eigenlösungen

$$\mathcal{H}\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle \tag{1.3}$$

des Hamiltonoperators (1.1) sind in der Ortsraumdarstellung die bekannten Hermitefunktionen:

(1.4)
$$\langle q|n\rangle = f_n(q) = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi}} \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!(2\omega)^n}} e^{\frac{1}{2}\omega q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-\omega q^2}$$

zu den Energieeigenwerten

(1.5)
$$E_n = \omega(n+\tfrac{1}{2}) \quad , n = 0,1,2,\cdots$$

Diese Lösungen bilden ein vollständiges Vektorsystem im Hilbertraum $\mathcal{L}^2(-\infty,\infty)$ der quadratintegrablen Funktionen.
Wichtig ist vor allem, daß man für die Oszillatorfunktionen (1.4) Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einführen kann:

(1.6)
$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(\omega q - ip)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(\omega q + ip)$$

mit den Eigenschaften

(1.7)
$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\ |n+1\rangle$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\ |n-1\rangle \ , \quad a|0\rangle = 0$$

$$[a, a^+]_- = 1$$

$$(a)^+ = a^+ \qquad \text{für die Oszillatorfunktionen}$$

Außerdem läßt sich der Hamiltonoperator des H.O. mit ihrer Hilfe umschreiben.

(1.8) $$\mathcal{H}(a^+, a) = \omega\left(a^+a + \tfrac{1}{2}\right)$$

1.2 Mehrzeitige Operatorprodukte

Um die Bezeichnungsweise zu vereinheitlichen und weitgehende Analogie zur Spinortheorie der Elementarteilchen herzustellen, wollen wir wie in MAISON/STUMPF [11], STUMPF [22] u. a. Arbeiten die Heisenbergoperatoren des Ortes und Impulses als "Feldoperatoren" schreiben.

(1.9) $$\psi_\alpha(t) = \left\{ \begin{array}{lll} q(t) & & \alpha = 1 \\ p(t) & \text{für} & \alpha = 2 \end{array} \right\}$$

Aus der Erzeuger-Vernichter-Darstellung ergibt sich dann beim H. O. eine Aufspaltung:

(1.10) $$\psi_\alpha(t) = \psi_\alpha^+(t) + \psi_\alpha^-(t)$$

$$\psi_\alpha^+(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (i\omega)^{\alpha-1} a^+(t)$$

$$\psi_\alpha^-(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (-i\omega)^{\alpha-1} a(t)$$

Natürlich läßt sich die zeitliche Abhängigkeit von $\psi_\alpha(t)$ wegen der zeitlichen Translationsinvarianz des Systems mit Hilfe des Hamiltonoperators H (q, p) ausdrücken:

(1.11) $$\psi_\alpha(t) = e^{it\mathcal{H}} \psi_\alpha(0)\, e^{-it\mathcal{H}}$$

Wie in der Feldtheorie [5] definieren wir jetzt mehrzeitige Operatorprodukte:

a) Symmetrisierte Produkte

$$S\,\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2)\cdots\psi_{\alpha_n}(t_n) = \frac{1}{n!}\sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)}\psi_{\alpha_{\lambda_1}}(t_{\lambda_1})\cdots\psi_{\alpha_{\lambda_n}}(t_{\lambda_n})$$

dabei bedeutet $\sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)}$ die Summe über alle Permutationen der $\lambda_1\cdots\lambda_n$ innerhalb der Zahlen $1\ldots n$, deren es bekanntlich gerade $n!$ gibt. Dieser Bezeichnungsweise werden wir uns auch im weiteren bedienen.

b) Zeitgeordnete Produkte

$$T\,\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2)\cdots\psi_{\alpha_n}(t_n) = \sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)}\Theta(t_{\lambda_1}-t_{\lambda_2})\cdots\Theta(t_{\lambda_{n-1}}-t_{\lambda_n})\,\psi_{\alpha_{\lambda_1}}(t_{\lambda_1})\cdots\psi_{\alpha_{\lambda_n}}(t_{\lambda_n})$$

dabei bewirkt die Sprungfunktion

$$\Theta(t_1-t_2) := \left\{\begin{array}{ll} 1 & \text{für } t_1 > t_2 \\ 0 & t_1 < t_2 \end{array}\right\}$$

gerade die Zeitordnung. In der Definition wurde bereits berücksichtigt, daß die Quanten des H.O. Boseteilchen sind. Aus der Definition folgt sofort die Symmetrie des T-Produktes bzgl. aller Argumentepaare $\binom{t_\lambda}{\alpha_\lambda}$.

c) Normalgeordnete Produkte

$$N\,\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2)\cdots\psi_{\alpha_n}(t_n) = :\psi_{\alpha_1}(t_1)\cdots\psi_{\alpha_n}(t_n):$$

d.h. es wird eine Aufspaltung der Feldoperatoren nach Erzeugern und Vernichtern ψ^+, ψ^- und eine Umordnung vorgenommen, derart daß die Erzeuger immer vor den Vernichtern stehen. Diese Definition stimmt mit der feldtheoretischen im Falle der freien und angekoppelten freien Felder überein.

1.3 Zweierprodukte und Kontraktionen

Es wird der Kommutator von Feldoperatoren beim H.O. zu verschiedenen Zeiten berechnet und mit seiner Hilfe S-, T- und N-Zweierprodukte ausgedrückt.

Aus den Vertauschungsrelationen für die Erzeuger und Vernichter a^+, a folgt zunächst in bekannter Weise durch Reihenentwicklung der Exponentialfunktion:

$$a\, e^{-it\mathcal{H}} = e^{-it(\mathcal{H}+\omega)}\, a$$

$$a^+ e^{-it\mathcal{H}} = e^{-it(\mathcal{H}-\omega)}\, a^+$$

Durch Zeitentwicklung nach (1.11) ergibt sich dann leicht:

(1.12)

$$\begin{aligned}
[a(t_1), a^+(t_2)]_- &= e^{it_1\mathcal{H}} a\, e^{-i(t_1-t_2)\mathcal{H}} a^+ e^{-it_2\mathcal{H}} - \\
&\quad - e^{it_2\mathcal{H}} a^+ e^{-i(t_2-t_1)\mathcal{H}} a\, e^{-it_1\mathcal{H}} \\
&= [a, a^+]_- e^{-i\omega(t_1-t_2)} \\
&= e^{-i\omega(t_1-t_2)}\, \underline{1}
\end{aligned}$$

$$[a(t_1), a(t_2)]_- = 0$$

$$[a^+(t_1), a^+(t_2)]_- = 0$$

Nun kann man auch die gewünschten ψ-Kommutatoren angeben:

(1.13)

$$\left[\psi^{-}_{\alpha_1}(t_1),\ \psi^{+}_{\alpha_2}(t_2)\right]_- = \frac{1}{2\pi i}(-)^{\alpha_1-1}(i\omega)^{\alpha_1-1+\alpha_2-1}e^{-i\omega(t_1-t_2)}\,1$$

$$= C(t_1,t_2;\alpha_1,\alpha_2)\,1$$

$$\left[\psi^{-}_{\alpha_1}(t_1),\psi^{-}_{\alpha_2}(t_2)\right]_- = 0$$

$$\left[\psi^{+}_{\alpha_1}(t_1),\psi^{+}_{\alpha_2}(t_2)\right]_- = 0$$

$$\left[\psi_{\alpha_1}(t_1),\psi_{\alpha_2}(t_2)\right]_- = \frac{1}{2\pi i}(i\omega)^{\alpha_1-1+\alpha_2-1}\left((-)^{\alpha_1-1}e^{-i\omega(t_1-t_2)}-(-)^{\alpha_2-1}e^{-i\omega(t_2-t_1)}\right)1$$

$$=\left(C(t_1,t_2;\alpha_1,\alpha_2)-C(t_2,t_1;\alpha_2,\alpha_1)\right)1$$

Die Berechnung von Zweierprodukten schließlich bereitet auch nicht mehr Schwierigkeiten:

(1.14)
$$\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) = N\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) + C(t_1,t_2;\alpha_1,\alpha_2)\,1$$

Beweis:

linke Seite = $\psi^{+}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{+}_{\alpha_2}(t_2) + \psi^{+}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{-}_{\alpha_2}(t_2) + \psi^{-}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{+}_{\alpha_2}(t_2) + \psi^{-}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{-}_{\alpha_2}(t_2)$

rechte Seite = $\psi^{+}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{+}_{\alpha_2}(t_2) + \psi^{+}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{-}_{\alpha_2}(t_2) + \psi^{+}_{\alpha_2}(t_2)\psi^{-}_{\alpha_1}(t_1) + \psi^{-}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{-}_{\alpha_2}(t_2)$

$$+ \psi^{-}_{\alpha_1}(t_1)\psi^{+}_{\alpha_2}(t_2) - \psi^{+}_{\alpha_2}(t_2)\psi^{-}_{\alpha_1}(t_1)$$

(1.14a)
$$\mathcal{S}\,\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) = N\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) + \frac{1}{2}\left(C(t_1,t_2;\alpha_1,\alpha_2) + C(t_2,t_1;\alpha_2,\alpha_1)\right)1$$

(1.14b)

$$T\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) = \Theta(t_1-t_2)\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) + \Theta(t_2-t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2)\psi_{\alpha_1}(t_1)$$

$$= N\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) + \left(\Theta(t_1-t_2)\,C\binom{t_1\,t_2}{\alpha_1\,\alpha_2} + \Theta(t_2-t_1)\,C\binom{t_2\,t_1}{\alpha_2\,\alpha_1}\right)1$$

(1.14c)

$$T\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) = N\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) + \left(\left(\Theta(t_1-t_2)-\tfrac{1}{2}\right)C\binom{t_1\,t_2}{\alpha_1\,\alpha_2} + \left(\Theta(t_2-t_1)-\tfrac{1}{2}\right)C\binom{t_2\,t_1}{\alpha_2\,\alpha_1}\right)1$$

Von Bedeutung ist ferner, daß man alle in (1.14) auftretenden sog. Kontraktionsterme, die Linearkombinationen von $C\binom{t_1\,t_2}{\alpha_1\,\alpha_2}$ und daher c-Zahlen sind, mit Hilfe der Zweipunktfunktion $F\binom{t_1\,t_2}{\alpha_1\,\alpha_2}$ darstellen kann:

(1.15)

$$F\binom{t_1\,t_2}{\alpha_1\,\alpha_2}1 := T\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2) - N\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2)$$

$$= \langle 0|\, T\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2)\,|0\rangle$$

Die letzte Zeile ist richtig, weil erstens F eine c-Zahl ist und zweitens alle Matrixelemente

$$\langle 0|\, N\psi_{\alpha_1}(t_1)\psi_{\alpha_2}(t_2)\,|0\rangle$$

verschwinden, da ja immer ein Vernichter ψ^- auf den Vakuumszustand $|0\rangle$ wirkt. Die explizite Form der Zweipunktfunktion für den H.O. wollen wir noch anmerken:

(1.16)

$$F\binom{t_1\,t_2}{\alpha_1\,\alpha_2} = \frac{1}{2\omega}\begin{pmatrix} 1 & i\omega\,\varepsilon(t_1-t_2) \\ -i\omega\,\varepsilon(t_1-t_2) & \omega^2 \end{pmatrix} e^{-i\omega|t_1-t_2|} = F\binom{t_2\,t_1}{\alpha_2\,\alpha_1}$$

mit der Vorzeichenfunktion $\varepsilon(t_1-t_2) = \left\{ \begin{matrix} 1 \\ -1 \end{matrix} \text{ für } \begin{matrix} t_1>t_2 \\ t_1<t_2 \end{matrix} \right\}$

Die angekündigte Umformung von (1.14) lautet dann:

(1.17 a) $$S\psi_1\psi_2 = N\psi_1\psi_2 + \mathfrak{N}_{12} F_{12} \cdot 1$$

b) $$T\psi_1\psi_2 = N\psi_1\psi_2 + F_{12}\, 1$$

c) $$T\psi_1\psi_2 = S\psi_1\psi_2 + i\, \mathfrak{Im} F_{12} \cdot 1$$

Zur Abkürzung haben wir, wo keine Unklarheiten auftreten können,

$\psi_{\alpha_k}(t_k) = \psi_k$ und $F(t_\alpha, t_\beta) = F_{12}$ gesetzt.

Wir wollen noch bemerken, daß die N-Produkte ebenfalls bzgl. aller Argumente symmetrisch sind. Das wird sofort klar, wenn man beachtet, daß Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in $\psi_\alpha(t)$ immer paarweise auftreten und Erzeuger (wie auch Vernichter) zu verschiedenen Zeiten miteinander kommutieren (1.13). Daher kommt im N-Produkt zu jedem Summand der adjungierte ($\psi^+ \longleftrightarrow \psi^-$), aber richtig geordnete (ψ^+ vor ψ^-) Ausdruck vor.

Zusatz: Die Beziehungen (1.14) bzw. (1.17) beruhen darauf, daß der mehrzeitige Kommutator von Feldoperatoren ein Vielfaches des Einheitsoperators ist, was im wesentlichen nur bei einem einzigen q.m. physikalischen System zutrifft, dem H.O. Beim Anharmonischen Oszillator wird z.B. (wie man nach längerer Rechnung feststellt):

$$[q(t_1), q(t_2)]_- = -i(t_1 - t_2)\, 1 + \tfrac{i}{2!}(t_1^3 - t_2^3)\, q^2 + \cdots$$

1.4 Das Wicksche Theorem

Das Wicksche Theorem wird formuliert und auf funktionale Form gebracht. - Der Beweis des Wickschen Satzes beruht auf einer Verallgemeinerung

der Überlegungen aus der vorigen Nummer. Man kann nämlich mit Hilfe von elementaren (aber unbequemen) Umformungen eine vollständige Induktion für n-fache Operatorprodukte durchführen:

(1.18)

$$\psi_{\mu_1}\psi_{\mu_2}\cdots\psi_{\mu_n} = N\psi_{\mu_1}\psi_{\mu_2}\cdots\psi_{\mu_n} + \sum_{[\mu_1\mu_2]} C_{\mu_1\mu_2} N\psi_{\mu_3}\cdots\psi_{\mu_n} +$$

$$+ \sum_{[\mu_1\cdots\mu_4]} C_{\mu_1\mu_2}C_{\mu_3\mu_4} N\psi_{\mu_5}\cdots\psi_{\mu_n} + \cdots$$

$$= \sum_{r=0}^{[\frac{n}{2}]} \sum_{[\mu_1\cdots\mu_{2r}]} C_{\mu_1\mu_2}\cdots C_{\mu_{2r-1}\mu_{2r}} N\psi_{\mu_{2r+1}}\cdots\psi_{\mu_n}$$

$[\mu_1\cdots\mu_{2r}]$ bedeutet $\begin{cases} (\mu_1\cdots\mu_{2r}) \in (1\cdots n) \\ \mu_1 < \mu_3 < \cdots < \mu_{2r-1} \\ \mu_{2k-1} < \mu_{2k} \ , \ k = 1\cdots r \end{cases}$

$[n] :=$ größte ganze Zahl, die kleiner als n ist

(1.18a)

$$S\psi_{\mu_1}\psi_{\mu_2}\cdots\psi_{\mu_n} = N\psi_{\mu_1}\cdots\psi_{\mu_n} + \sum_{[\mu_1\mu_2]} \mathcal{R}n\, F_{\mu_1\mu_2} N\psi_{\mu_3}\cdots\psi_{\mu_n} +$$

$$+ \sum_{[\mu_1\cdots\mu_4]} \mathcal{R}n\, F_{\mu_1\mu_2}\mathcal{R}n\, F_{\mu_3\mu_4} N\psi_{\mu_5}\cdots\psi_{\mu_n} + \cdots$$

$$= N\psi_{\mu_1}\cdots\psi_{\mu_n} + \sum_{\mu_1\neq\mu_2} \tfrac{1}{2}\mathcal{R}n\, F_{\mu_1\mu_2} N\psi_{\mu_3}\cdots\psi_{\mu_n} +$$

$$+ \sum_{\mu_1\neq\mu_2\neq\mu_3\neq\mu_4} \tfrac{1}{8}\mathcal{R}n\, F_{\mu_1\mu_2}\mathcal{R}n\, F_{\mu_3\mu_4} N\psi_{\mu_5}\cdots\psi_{\mu_n} + \cdots$$

(weil F symmetrisch ist)

$$= N\psi_{\mu_1}\cdots\psi_{\mu_n} + \sum_{(\mu_1\cdots\mu_n)} \tfrac{1}{2(n-2)!}\mathcal{R}n\, F_{\mu_1\mu_2} N\psi_{\mu_3}\cdots\psi_{\mu_n} + \cdots$$

(weil das N-Produkt symmetrisch ist)

$$= \sum_{(\mu_1\cdots\mu_n)} \sum_{r=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{1}{2^r r!(n-2r)!}\mathcal{R}n\, F_{\mu_1\mu_2}\cdots\mathcal{R}n\, F_{\mu_{2r-1}\mu_{2r}} N\psi_{\mu_{2r+1}}\cdots\psi_{\mu_n}$$

(1.18b)

$$T\psi_{\lambda_1}\cdots\psi_{\lambda_n} = \sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)} \sum_{r=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{\nearrow}{2^r r!(n-2r)!} F_{\lambda_1\lambda_2}\cdots F_{\lambda_{2r-1}\lambda_{2r}} N\psi_{\lambda_{2r+1}}\cdots\psi_{\lambda_n}$$

(1.18c)

$$T\psi_{\lambda_1}\cdots\psi_{\lambda_n} = \sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)} \sum_{r=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{i^r}{2^r r!(n-2r)!} \mathfrak{Im} F_{\lambda_1\lambda_2}\cdots \mathfrak{Im} F_{\lambda_{2r-1}\lambda_{2r}} N\psi_{\lambda_{2r+1}}\cdots\psi_{\lambda_n}$$

Wir behaupten jetzt, daß sich diese Formeln (1.18) viel kompakter und übersichtlicher auf folgende funktionale Art schreiben lassen:

(1.19) a) $$S(j_1 j_2) = e^{-\frac{1}{4}(j\,\mathfrak{Re}F\,j)} \cdot N(j_1 j_2)$$

b) $$T(j_1 j_2) = e^{-\frac{1}{4}(jFj)} \cdot N(j_1 j_2)$$

c) $$T(j_1 j_2) = e^{-\frac{i}{4}(j\,\mathfrak{Im}F\,j)} S(j_1 j_2)$$

Wie haben dabei die aus den Arbeiten von STUMPF und Mitarbeitern [z.B.11] bekannten Abkürzungen benützt, wobei sich besonders die Summenkonvention bewährt, wonach über zweimal auftretende griechische Indizes summiert wird (sie nehmen jedesmal die beiden Werte 1 und 2 an):

(1.20) $$T(j_1 j_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1\cdots dt_n\; j_{\alpha_1}(t_1)\cdots j_{\alpha_n}(t_n)\, T\psi_{\alpha_1}(t_1)\cdots\psi_{\alpha_n}(t_n)$$

entsprechend $S(j_1 j_2)$, $N(j_1 j_2)$

Die Funktionen $j_\alpha(t), j_\beta(t), -\infty < t < \infty$ **gehören einer noch näher zu bestimmenden Klasse an. Die quadratische Form (j F j) ist folgendermaßen definiert (vgl. auch SYMANZIK [27]):**

(1.21)

$$(jFj) := \int d\xi\, d\eta\; F\begin{pmatrix}\xi & \eta\\ \beta & \alpha\end{pmatrix} j_\beta(\xi) j_\alpha(\eta)$$

Die Entwicklung (1.20) - eine sog. Volterra-Reihe - wollen wir zunächst rein formal verstanden wissen, ihre Konvergenz für den H.O. wird im nächsten Kapitel 2 bewiesen. Hier soll am Beispiel von (1.19.b) der Nachweis geführt werden, daß linke und rechte Seite gliedweise übereinstimmten, wenn wir einen Koeffizientenvergleich der j(t)-Potenzen anstellen.

$$e^{-\frac{1}{2}(jF_j)}\, N(j_1 j_2) = \sum_{r=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-)^r\, i^k}{2^r r!\, k!} \int d\xi_1 \cdots d\xi_{2r}\, d\eta_1 \cdots d\eta_k\; j_{\sigma_1}(\xi_1)\cdots j_{\sigma_{2r}}(\xi_{2r}) \times$$

$$\times\, j_{\sigma_1}(\eta_1)\cdots j_{\sigma_k}(\eta_k)\, F\begin{pmatrix}\xi_1 & \xi_2\\ \xi_3 & \xi_4\end{pmatrix}\cdots F\begin{pmatrix}\xi_{2r-1} & \xi_{2r}\\ \xi_{2r-1} & \rho_{2r}\end{pmatrix} N\, \psi_{\sigma_1}(\eta_1)\cdots\psi_{\sigma_k}(\eta_k)$$

Substitution: $n = k+2r$, $(\xi_1 \cdots \xi_{2r}\, \eta_1 \cdots \eta_k) \to (t_1 \cdots t_n)$, $(\rho_1 \cdots \rho_{2r}\, \sigma_1 \cdots \sigma_k) \to (\alpha_1 \cdots \alpha_n)$

$$e^{-\frac{1}{2}(jF_j)}\, N(j_1 j_2) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{i^n}{2^r r!\,(n-2r)!} \int dt_1 \cdots dt_n\; j_{\alpha_1}(t_1)\cdots j_{\alpha_n}(t_n) \times$$

$$\times\, F\begin{pmatrix}t_1 & t_2\\ \alpha_1 & \alpha_2\end{pmatrix}\cdots F\begin{pmatrix}t_{2r-1} & t_{2r}\\ \alpha_{2r-1} & \alpha_{2r}\end{pmatrix} N\, \psi_{\alpha_{2r+1}}(t_{2r+1})\cdots\psi_{\alpha_n}(t_n)$$

Koeffizientenvergleich:

linke Seite = $\frac{1}{n!}\sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)} T\,\psi_{\lambda_1}\cdots\psi_{\lambda_n} = T\,\psi_1\cdots\psi_n$

rechte Seite = $\sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)}\sum_{r=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{1}{2^r r!\,(n-2r)!}\, F_{\lambda_1\lambda_2}\cdots F_{\lambda_{2r-1}\lambda_{2r}}\, N\,\psi_{\lambda_{2r+1}}\cdots\psi_{\lambda_n}$

q.e.d.

Zusatz: SCHULER [16] hat versucht, auch für andere q.m. Systeme Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einzuführen. Doch selbst wenn das in gewissen Fällen möglich ist, kann man keine dem Wickschen Theorem entsprechende Beziehung aufstellen, weil der Beweis als notwendige Voraussetzung das Herausziehen der Zweipunktfunktion (bzw. Vakuumerwartungswerte) verlangt und damit unter anderem die Tatsache, daß der mehrzeitige Kommutator eine c-Zahl ist.

Kapitel 2

Berechnung von Eigenfunktionalen des H.O.

2.1 Matrixelement von operatorwertigen Funktionalen

Folgende Begriffe werden eingeführt: Matrixelemente von Operatorprodukten, Eigenfunktionale und funktionale Differentiation.
Wir wollen die Elemente des Zustandsraumes $\mathcal{H}$ der (nichtrelativistischen) Q.M. durch "Ket"vektoren von DIRAC [4] kennzeichnen $|b\rangle \in \mathcal{H}$ und die Elemente des Dualraumes (der bei der Realisierung $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2 =$ Menge der Lebesgue-meßbaren, quadratintegrablen Funktionen mit dem Raum $\mathcal{L}^2$ übereinstimmt) durch "Bra"vektoren $\langle a|$. Dann lassen sich die Matrixelemente der in Kap. 1 definierten Operatorprodukte als Funktionen von mehreren Veränderlichen schreiben.

(2.1. a) $$\sigma^{k}_{ab}\begin{pmatrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{pmatrix} = \langle a | S\, \psi_{\alpha_1} \cdots \psi_{\alpha_k} | b \rangle$$

b) $$\varsigma^{k}_{ab}\begin{pmatrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{pmatrix} = \langle a | N\, \psi_{\alpha_1} \cdots \psi_{\alpha_k} | b \rangle$$

c) $$\tau^{k}_{ab}\begin{pmatrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{pmatrix} = \langle a | T\, \psi_{\alpha_1} \cdots \psi_{\alpha_k} | b \rangle$$

Wie man durch Einschieben des Projektionsoperators $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$, wobei die $|n\rangle$ eine Basis im Raum $\mathcal{H}$ bilden (beim H.O. also die Energieeigenfunktionen), d.h. also durch Einschieben von Zwischenzuständen, sowie durch Zeitentwicklung der Operatoren $\psi_\alpha(t)$ erkennt, sind alle diese σ-, ς-, τ-Funktionen Linearkombinationen von ebenen Wellen e^{ikt}

und gehören daher zur Klasse der i. a. unstetigen fastperiodischen Funktionen.

Entsprechend kann man auch Matrixelemente der in Kap. 1 behandelten operatorwertigen Funktionale bilden und erhält dann skalarwertige Funktionale:

(2. 2 a)

$$S_{ab}(j_1 j_2) = \langle a | S(j_1 j_2) | b \rangle$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \int dt_{\alpha_1} \cdots dt_{\alpha_k} \, \varrho_{ab}^{k}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k}) \, j_{\alpha_1}(t_{\alpha_1}) \cdots j_{\alpha_k}(t_{\alpha_k})$$

b)

$$N_{ab}(j_1 j_2) = \langle a | N(j_1 j_2) | b \rangle$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \int dt_{\alpha_1} \cdots dt_{\alpha_k} \, \varrho_{ab}^{k}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k}) \, j_{\alpha_1}(t_{\alpha_1}) \cdots j_{\alpha_k}(t_{\alpha_k})$$

c)

$$T_{ab}(j_1 j_2) = \langle a | T(j_1 j_2) | b \rangle$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \int dt_{\alpha_1} \cdots dt_{\alpha_k} \, \tau_{ab}^{k}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k}) \, j_{\alpha_1}(t_{\alpha_1}) \cdots j_{\alpha_k}(t_{\alpha_k})$$

$$= \langle a | T \, e^{i \int dt \, \varphi_\alpha(t) j_\alpha(t)} | b \rangle$$

Die zweite Zeile ist jeweils nur dann richtig, wenn diese Volterra-Reihen in irgendeinem Sinn konvergieren, die dritte Zeile in der dritten Formel ist eine viel gebrauchte Abkürzung, die aber nach den neuesten Arbeiten von SOHR [21] eine allgemeinere Definition der Funktionale implizit enthält (sog. Produktdarstellung).

Beschränken wir uns wie bisher auf einen separablen Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit der Basis $|k\rangle$, $k \in$ Indexmenge I, so kann jeder Vektor $|a\rangle \in \mathcal{H}$ mit Hilfe von komplexen Koeffizienten darin dargestellt werden:

(2.3)
$$|a\rangle = \sum_{k \in I} A_k |k\rangle$$

mit
$$\sum_k |A_k|^2 < \infty \quad , \quad A_k = \langle k|a\rangle \, ,$$

falls die Basisvektoren orthonormiert sind. Wählt man insbesondere als Basis ein vollständiges, orthonormiertes Eigenvektorsystem von kommutierenden Observablen eines physikalischen Systems, so kann man die Matrixelemente (2.2) für beliebiges $|a\rangle$ und $|b\rangle$ darstellen:

(2.4)
$$T_{ab}(j_1 j_2) = \sum_{k,\ell} \bar{A}_k B_\ell \, T_{k\ell}(j_1 j_2)$$

dabei konvergiert wegen (2.3) $T_{ab}(j_1 j_2)$ falls die $T_{k\ell}(j_1 j_2)$ existieren. Wir wollen daher die $T_{k\ell}(j_1 j_2)$ bzw. $S_{k\ell}(j_1 j_2)$, $N_{k\ell}(j_1 j_2)$ "Eigenfunktionale" des entsprechenden physikalischen Systems zum vorgegebenen Satz von Observablen nennen. Beim H.O. bilden die Energieeigenfunktionen $f_n(q)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ eine orthonormierte Basis, wir betrachten folglich im weiteren die Energieeigenfunktionale des H.O.
Seien nun die Eigenfunktionale eines bestimmten Systems bekannt, wie erhält man aus ihnen die zugehörigen σ-, ς-, τ-Funktionen ? Die Frage läßt sich leicht und mit Hilfe der Variationsableitung (auch "Funktionalableitung") beantworten:

(2.5)
$$\tau^{k}_{ab}\begin{pmatrix} t_1 \ldots t_k \\ \alpha_1 \ldots \alpha_k \end{pmatrix} = \frac{\delta^k}{i\delta j_{\alpha_1}(t_1) \, i\delta j_{\alpha_2}(t_2) \cdots i\delta j_{\alpha_k}(t_k)} \, T_{ab}(j_1 j_2) \Big|_{j_1 = j_2 = 0}$$

dabei bedeutet $\frac{\delta}{\delta j(t)}$ die aus der Variationsrechnung bekannte Ableitung, vgl. z. B. NOVOZHILOV/TULUB [12], FRIEDRICHS [6]. Für unsere Zwecke ist die folgende Formel zur Berechnung der Ableitung immer geeignet (siehe auch RAMPACHER/STUMPF/WAGNER [13]), weil sie bei uns nur auf Testfunktionen angewendet wird, so daß der Einwand von SCHEERER [14] hinfällig ist.

(2.6)

$$\frac{\delta}{i\,\delta j(t)}\,\mathcal{F}[j(x)] = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\mathcal{F}[j(x)+\varepsilon\delta(x-t)]-\mathcal{F}[j(x)]}{i\varepsilon}$$

Aus der Relation (2.5) wird auch die Bezeichnung "Erzeugendes Funktional" für die verschiedenen skalarwertigen Funktionale klar (MAISON [10], BEREZIN [1]). Die Volterra-Reihe entspricht also formal der Taylor-Reihe mit den σ-, ς-, τ -Funktionen als Koeffizienten. Schließlich können wir die Wickregel auch in den erzeugenden Funktionalen formulieren:

(2.7 a)

$$S_{ab}(j_1 j_2) = e^{-\frac{i}{2}(j\,\mathrm{Re}F\,j)}\,N_{ab}(j_1 j_2)$$

b)

$$T_{ab}(j_1 j_2) = e^{-\frac{i}{2}(jFj)}\,N_{ab}(j_1 j_2)$$

c)

$$T_{ab}(j_1 j_2) = e^{-\frac{i}{2}(j\,\mathrm{Im}F\,j)}\,S_{ab}(j_1 j_2)$$

Zusatz: Von DÜRR/WAGNER [5] wurden in der nichtlinearen Spinortheorie noch weitere Funktionen und zugehörige erzeugende Funktionale verwendet. Die $\int$ -Funktionen sind Matrixelemente von Operatorprodukten, bei denen alle(divergenten) Vakuumerwartungswerte subtrahiert werden:

$$\int^{k}_{ab}\left(\begin{matrix}t_1 \cdots t_k\\ \alpha_1 \cdots \alpha_k\end{matrix}\right) = \langle a|\,::\psi_{\alpha_1}(t_1)\cdots\psi_{\alpha_k}(t_k)::\,|b\rangle$$

Wie schon in Kap. 1 bemerkt, stimmen $\int$ - und ς -Funktionen für den H.O. bzw. den Fall der freien Felder überein.

Die φ -Funktionen werden aus dem Φ -Funktional abgeleitet, das durch eine Funktionaltransformation analog der Wickregel aus dem T-Funktional hervorgeht.

$$\Phi_{ab}(j_1 j_2) = e^{\frac{i}{2}(jFj)}\, T_{ab}(j_1 j_2)$$

mit der allgemeinen Zweipunktfunktion

$$F_{12} = \langle 0 | T\, \psi_1 \psi_2 | 0 \rangle$$

Ein Vergleich ergibt beim H.O. (aber auch nur dort) eine Äquivalenz von φ - und φ -Funktionen.

2.2 Energieeigenfunktionale des H.O.

Für die Energieeigenfunktionale des H.O. werden mittels q.m. Methoden geschlossene Ausdrücke berechnet, sie sind in den Formeln (2.14) und (2.15) zusammengefaßt. -

In dieser Nummer wollen wir die Konvergenz der Volterra-Reihe für die Eigenfunktionale $S_{ke}(j_1 j_2)$, $N_{ke}(j_1 j_2)$, $T_{ke}(j_1 j_2)$ beim H.O. nachweisen, indem wir sie mit Hilfe der Schrödingertheorie direkt konstruieren. Wegen der Wickschen Regeln (2.7) genügt es dabei, wenn wir die einfachsten, nämlich die Erzeugenden Funktionale der normalgeordneten φ -Funktionen berechnen. Für die normalgeordneten Operatorprodukte können wir durch Zerlegen in Erzeuger und Vernichter schreiben:

$$N_{\psi_1 \cdots \psi_k} = \psi^+_{\lambda_1} \cdots \psi^+_{\lambda_k} + \sum_{\lambda_1=1}^{k} \psi^+_{\lambda_1} \cdots [\psi^+_{\lambda_1}] \cdots \psi^+_{\lambda_k} \psi^-_{\lambda_1} + \sum_{\lambda_1<\lambda_2} \psi^+_{\lambda_1} \cdots [\psi^+_{\lambda_1} | \psi^+_{\lambda_2}] \cdots \psi^+_{\lambda_k} \psi^-_{\lambda_1} \psi^-_{\lambda_2}$$

$$+ \cdots + \psi^-_{\lambda_1} \cdots \psi^-_{\lambda_k}$$

$$= \sum_{(\lambda_1 \cdots \lambda_k)} \sum_{r=0}^{k} \frac{1}{r!(k-r)!}\, \psi^+_{\lambda_1} \cdots \psi^+_{\lambda_r}\, \psi^-_{\lambda_{r+1}} \cdots \psi^-_{\lambda_k}$$

Die Bezeichnung [$\psi^+_{\lambda_1} | \psi^+_{\lambda_2} | \cdots$] soll andeuten, daß in der Folge die betreffenden Elemente fehlen. Man beachte nochmals die Symmetrie des N-Produktes !

Durch Bildung von Matrixelementen erhalten wir die ς -Funktionen, die wir entsprechend der obigen Zerlegung in einzelne Summanden aufteilen:

$$(2.8) \qquad \varsigma^{k}_{mn}\left(\begin{smallmatrix} t_1 & \cdots & t_k \\ \alpha_1 & \cdots & \alpha_k \end{smallmatrix}\right) = \langle m | N \psi_1 \cdots \psi_k | n \rangle$$

$$= \sum_{l=0}^{k} \varsigma^{k\,|\,l}_{mn}\left(\begin{smallmatrix} t_1 & \cdots & t_k \\ \alpha_1 & \cdots & \alpha_k \end{smallmatrix}\right)$$

Zunächst werten wir folgende Übergangsmatrixelemente aus:

(2.9)

$$\langle m | \psi^+_\alpha(t) | n \rangle = \langle m | \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (i\omega)^{\alpha-1} e^{it\mathcal{H}} a^+ e^{-it\mathcal{H}} | n \rangle$$

$$= \sqrt{m} \cdot \delta_{m,\alpha+1} \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (i\omega)^{\alpha-1} e^{i\omega t}$$

$$\langle m | \psi^-_\alpha(t) | n \rangle = \sqrt{m+1} \cdot \delta_{m,\alpha-1} \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (-i\omega)^{\alpha-1} e^{-i\omega t}$$

Dabei wurden die Eigenschaften der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren a^+, a aus (1.7) verwendet. Dann können wir durch Einschalten von Zwischenzuständen die einzelnen Summanden in (2.8) ausrechnen:

$$\varsigma^{k\,|\,0}_{mn} = \langle m | \psi^+_1 \cdots \psi^+_k | n \rangle$$

$$= \sum_{\ell_1 \cdots \ell_{k-1}} \langle m | \psi^+_1 | \ell_1 \rangle \langle \ell_1 | \psi^+_2 | \ell_2 \rangle \cdots \langle \ell_{k-1} | \psi^+_k | n \rangle$$

$$= \begin{cases} \sqrt{\frac{m!}{n!}}\, \delta_{m-n,k}\, \frac{1}{\sqrt{2\omega}^k}\, (i\omega)^{\alpha_1-1+\cdots+\alpha_k-1} e^{i\omega(t_1+\cdots+t_k)} & \text{für } m-n \geq 0 \\ 0 & m-n<0 \end{cases}$$

$$S^{k\,|\,n}_{m\,n} = \langle m \,|\, \sum_{\lambda=1}^{k} \psi_n^+ \cdots [\psi_{\lambda_\nu}^+] \cdots \psi_k^+ \psi_{\lambda_\nu}^- \,|\, n \rangle$$

$$= \begin{cases} n! \sqrt{\frac{m!}{n!}}\ \delta_{m+2-n,k}\ \frac{1}{\sqrt{2\omega}^{\,k}}\ (i\omega)^{\alpha_n - 1 + \cdots + \alpha_k - 1}\ e^{i\omega(t_n + \cdots + t_k)} \sum_{\lambda_\nu=1}^{k} (-)^{\alpha_{\lambda_\nu}-1}\ e^{-2i\omega t_{\lambda_\nu}} & \text{für } m+2-n \geq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Durch vollständige Induktion zeigt man leicht:

(2.10)
$$S^{k\,|\,\ell}_{m\,n} = \frac{n!}{(n-\ell)!} \sqrt{\frac{m!}{n!}}\ \frac{1}{\sqrt{2\omega}^{\,k}}\ (i\omega)^{\alpha_n - 1 + \cdots + \alpha_k - 1}\ e^{i\omega(t_n + \cdots + t_k)} \cdot$$

$$\cdot \sum_{\lambda < \cdots < \lambda_\ell} (-)^{\alpha_{\lambda_\nu}-1 + \cdots + \alpha_{\lambda_\ell}-1}\ e^{-2i\omega(t_{\lambda_\nu} + \cdots + t_{\lambda_\ell})} \quad , \quad \text{für } m+2\ell-n \geq 0$$

Durch Summation entsteht daraus schließlich

(2.11)
$$S^{k}_{m\,n} = \frac{\sqrt{m!\,n!}}{\left(\frac{m+n-k}{2}\right)!}\ \frac{1}{\sqrt{2\omega}^{\,k}}\ (i\omega)^{\alpha_n - 1 + \cdots + \alpha_k - 1}\ e^{i\omega(t_n + \cdots + t_k)} \cdot$$

$$\cdot \sum_{\lambda_\nu < \cdots < \lambda_\ell}^{1 \cdots k} (-)^{\alpha_{\lambda_\nu}-1 + \cdots + \alpha_{\lambda_\ell}-1}\ e^{-2i\omega(t_{\lambda_\nu} + \cdots + t_{\lambda_\ell})}$$

mit $k = m+n \pmod 2$ **und** $\mathrm{Max}(m-n, n-m) \leq k \leq m+n$

wobei $\ell = \frac{1}{2}(k+n-m)$

Die Berechnung der N-Funktionale gestaltet sich ebenso straightforward, wenn auch mühselig:

$$N_{m\,n}(j_1 | j_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \int dt_n \cdots dt_k\ S^{k}_{m\,n} \begin{pmatrix} t_n & \cdots & t_k \\ \alpha_n & \cdots & \alpha_k \end{pmatrix} j_n \cdots j_k$$

$$= \sum_{\substack{k=\max(m-n,n-m) \\ k\equiv m+n\ (2)}}^{m+n} \frac{i^k}{k!} \frac{\sqrt{m!n!}}{(n-\ell)!} \frac{1}{\sqrt{2\omega}^k} \int dt_1 \cdots dt_k\, j_1 \cdots j_k\, (i\omega)^{\alpha_1-1+\cdots+\alpha_k-1} e^{i\omega(t_1+\cdots t_k)} \times$$

$$\times \sum_{\lambda_1<\cdots<\lambda_\ell} (-)^{\alpha_{\lambda_1}-1+\cdots+\alpha_{\lambda_\ell}-1} e^{-2i\omega(t_{\lambda_1}+\cdots+t_{\lambda_\ell})}$$

Substitution: $\ell = \frac{1}{2}(k+n-m)$

$$= \sum_{\ell=\max(0,n-m)}^{n} \frac{\sqrt{m!n!}}{(2\ell+m-n)!\,(n-\ell)!} \left(\frac{i}{\sqrt{2\omega}}\right)^{2\ell+m-n} \int dt_1 \cdots dt_{2\ell+m-n}\, j_1 \cdots j_{2\ell+m-n} \times$$

$$\times (i\omega)^{\alpha_1-1+\cdots+\alpha_{2\ell+m-n}} e^{i\omega(t_1+\cdots+t_{2\ell+m-n})} \underbrace{\sum_{\lambda_1<\cdots<\lambda_\ell} (-)^{\alpha_{\lambda_1}-1+\cdots+\alpha_{\lambda_\ell}-1} e^{-2i\omega(t_{\lambda_1}+\cdots+t_{\lambda_\ell})}}$$

Dieser Ausdruck ist in den Integrationsvariablen $\binom{t_1 \cdots t_{2\ell+m-n}}{\alpha_1 \cdots \alpha_{2\ell+m-n}}$ symmetrisch, daher kann man die Summe durch geeignete Umbenennung der Variablen durch einen einzigen Summanden mit dem kombinatorischen Gewicht $\binom{2\ell+m-n}{\ell}$ ersetzen.

$$= \sum_{\ell=\max(0,n-m)}^{n} \frac{\sqrt{m!n!}}{(n-\ell)!\ell!(\ell+m-n)!} \left(\frac{i}{\sqrt{2\omega}}\right)^{2\ell+m-n} \int dt_1 \cdots dt_\ell\, j_1 \cdots j_\ell\, (-i\omega)^{\alpha_1-1+\cdots+\alpha_\ell-1} e^{-i\omega(t_1+\cdots t_\ell)} \times$$

$$\times \int dt_1 \cdots dt_{\ell+m-n}\; j_1 \cdots j_{\ell+m-n}\, (i\omega)^{\alpha_1-1+\cdots+\alpha_{\ell+m-n}-1} e^{i\omega(t_1+\cdots+t_{\ell+m-n})}$$

$$= \sum_{\ell=\max(0,n-m)}^{n} \frac{\sqrt{m!n!}}{(n-\ell)!\ell!(\ell+m-n)!} \left(\frac{\tilde{j}_1(\omega) - i\omega\,\tilde{j}_2(\omega)}{\sqrt{2\omega}}\right)^{\ell} \cdot \left(\frac{\tilde{j}_1(-\omega) + i\omega\,\tilde{j}_2(-\omega)}{\sqrt{2\omega}}\right)^{\ell+m-n}$$

Das Resultat gibt uns die Möglichkeit, die Klasse der Quellfunktionen $j_\alpha(t)$ beim H.O. näher zu kennzeichnen, da die Fouriertransformierte

(2.12)

$$\tilde{j}_\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} j_\alpha(t)\, dt \quad , \quad \alpha = 1,2$$

existieren muß. Wir werden also etwa Funktionen aus dem Raum S der stark abfallenden Funktionen wählen, wo eine Fouriertransformierte immer existiert. Für spätere Zwecke notieren wir noch eine praktische Umformung des N-Funktionals:

(2.13)

(2.14)

$$N_{mn}(j_1 j_2) = \begin{cases} N_{0,n-m}(j_1 j_2) \sum_{\ell=0}^{m} \frac{\sqrt{m!\,n!\,(n-m)!}}{(m-\ell)!\,\ell!\,(\ell+n-m)!} (-j\,\hat{R}_{12}F_j)^\ell & \text{für } m-n \le 0 \\ N_{m-n,0}(j_1 j_2) \sum_{\ell=0}^{n} \frac{\sqrt{m!\,n!\,(m-n)!}}{(n-\ell)!\,\ell!\,(\ell+m-n)!} (-j\,\hat{R}_{12}F_j)^\ell & \text{für } m-n \ge 0 \end{cases}$$

$$T_{mn}(j_1 j_2) = e^{-\frac{1}{2}(jF_j)}\, N_{mn}(j_1 j_2)$$

Insbesondere erhält man für die Übergangsmatrixelemente vom Grundzustand in den n-ten angeregten Zustand:

(2.15)

$$N_{0,\ell}(j_1 j_2) = \frac{1}{\sqrt{\ell!}} \left(\frac{i}{\sqrt{2\omega}} \int e^{-i\omega t} j_1(t)\, dt + \frac{\omega}{\sqrt{2\omega}} \int e^{-i\omega t} j_2(t)\, dt \right)^\ell$$

$$N_{\ell,0}(j_1 j_2) = (-j)^\ell \overline{N_{0,\ell}(j_1 j_2)}$$

Außerdem wurde in (2.14) eine wichtige Beziehung berücksichtigt:

(2.16)

$$(j\,R_n F_j) = \left| \frac{i\hat{j}_1(\omega) + \omega \hat{j}_2(\omega)}{\sqrt{2\omega}} \right|^2$$

die man direkt beweist. Wir haben also geschlossene Ausdrücke in Form von endlichen Summen für die Eigenfunktionale des H.O. gefunden, so daß die Volterra-Reihe für alle $j(t) \in \mathcal{S}$ konvergiert.

2.3 Besondere Eigenschaften der Eigenfunktionale

Beim H.O. kann die Unitarität des operatorwertigen T-Funktionals gezeigt werden, außerdem wird eine funktionale Erzeuger-Vernichter-Darstellung angegeben. -

Für dieselbe Klasse von Quellfunktionen j(t) - nämlich aus dem Raum für welche die Volterra-Reihe der T-Funktionale beim H.O. konvergiert, können wir sogar die Unitarität des Zeitordnungsoperators $T(j_1\, j_2)$ nachweisen. Darunter verstehen wir die Relation:

(2.17)
$$\sum_{m=0}^{\infty} T_{km}(j_1 j_2)\, \overline{T_{\ell m}(j_1 j_2)} = \sum_{m=0}^{\infty} \langle k | T(j_1 j_2) | m \rangle \langle m | \overline{T(j_1 j_2)} | \ell \rangle$$

$$= \langle k | T(j_1 j_2)\, \overline{T(j_1 j_2)} | \ell \rangle$$

$$= \langle k | \ell \rangle = \delta_{k\ell}$$

Bereits DAMMEIER [2] hat die Beziehung (2.17) für $k = \ell = 0$ gefunden:

$$\sum_{m=0}^{\infty} |T_{0m}(j_1 j_2)|^2$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \left| e^{-\frac{1}{2}(j F_j)} \right|^2 \frac{1}{m!} \left| \frac{i\tilde{j}_1(\omega) + \omega \tilde{j}_2(\omega)}{\sqrt{2\omega}} \right|^{2m}$$

$$= e^{-(j R_n F_j)} \cdot \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (j R_n F_j)^m$$

$$= 1$$

Durch Induktion läßt sich (2.17) für alle k und l zeigen, wir bringen dazu zwei Beispiele und unterdrücken wegen der Länge der Rechnungen den Induktionsschluß.

<u>Beispiel 1</u>: k = 1, ℓ = 0

$$\sum_{m=0}^{\infty} N_{1m}(j_1 j_2) \overline{N_{0m}(j_1 j_2)}$$

$$= N_{10} \overline{N_{00}} + \sum_{m=1}^{\infty} N_{0,m-1} \overline{N_{0m}} \sum_{k=0}^{1} \frac{\sqrt{m!(m-1)!}}{(1-k)!\, k!\, (k+m-1)!} (-j R_n F_j)^k$$

$$= -\overline{N_{01}} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} (j R_n F_j)^{m-1} \frac{1}{\sqrt{m}} \overline{N_{01}} \left(\sqrt{m} - \frac{1}{\sqrt{m}} (j R_n F_j) \right)$$

$$= -\overline{N_{01}} + \overline{N_{01}} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{(m-1)!} (j R_n F_j)^{m-1} - \frac{1}{m!} (j R_n F_j)^m \right)$$

$$= 0$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} T_{1m}(j_1 j_2) \overline{T_{0m}(j_1 j_2)} = 0 = \delta_{01}$$

Beispiel 2: $k = \ell = 1$

$$\sum_{m=0}^{\infty} |N_{1m}(j_1 j_2)|^2$$

$$= |N_{10}|^2 + \sum_{m=1}^{\infty} |N_{0,m-1}|^2 \left(\sum_{k=0}^{1} \frac{\sqrt{m!\,(m-1)!}}{(1-k)!\,k!\,(k+m-1)!} (-j \mathcal{R}_m F_j)^k \right)^2$$

$$= (j \mathcal{R}_m F_j) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(m-1)!} (j \mathcal{R}_m F_j)^{m-1} \left(\sqrt{m} - \frac{1}{\sqrt{m}} (j \mathcal{R}_m F_j) \right)^2$$

$$= (j \mathcal{R}_m F_j) + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m+1}{m!} (j \mathcal{R}_m F_j)^m - 2 (j \mathcal{R}_m F_j) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (j \mathcal{R}_m F_j)^m + (j \mathcal{R}_m F_j) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} (j \mathcal{R}_m F_j)^m$$

$$= e^{(j \mathcal{R}_m F_j)}$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} |T_{1m}(j_1 j_2)|^2 = 1 = \delta_{11}$$

Das bei der Lösung der Funktionalgleichungen für $T_{mm'}(j_1 j_2)$ in Kap. 3 auftretende Problem, die Lösungsfunktionale noch weiter zu charakterisieren, läßt sich unter Umständen durch die Unitaritätsforderung (2.17) beantworten.

Diese Unitarität der T-Funktionale in der Quantenmechanik wird nahegelegt durch eine formale Äquivalenz der Volterrareihe (2.2 c) und der "Produktdarstellung"

(2.18)
$$T_{mm'}(j_1 j_2) = \langle m | e^{i t_1 \mathcal{H}} e^{i (t_2 - t_1)(c_1 q + c_2 p - \mathcal{H})} e^{-i t_2 \mathcal{H}} | m' \rangle$$

für die folgende Funktionenklasse (die im Raum $\mathcal{S}$ dicht liegt):

(2.19)
$$j_\alpha(t) = \left\{ \begin{array}{ll} c_\alpha & \text{für } t_1 \le t \le t_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{array} \right\}, \quad \alpha = 1,2$$

Der formale Beweis verläuft wie folgt: Für die Funktionen (2.19) lautet die Volterra-Reihe:

$$T_{mm'}(c_1 c_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} c_{\alpha_1} \cdots c_{\alpha_n} \int_{t_1}^{t_2} d\xi_1 \cdots d\xi_n \langle m | T \psi_{\alpha_1} \cdots \psi_{\alpha_n} | m' \rangle$$

Unter Benutzung der "Schwingerentwicklung"

$$e^{t(A+\lambda B)} = e^{tA} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \int_0^t T B(\xi_1) \cdots B(\xi_n) \, d\xi_1 \cdots d\xi_n$$

$$B(\xi) := e^{i\xi \mathcal{H}} B(0) e^{-i\xi \mathcal{H}}$$

folgt sofort

$$e^{i(t_2-t_1)(c_1 q + c_2 p - \mathcal{H})}$$

$$= e^{-i(t_2-t_1)\mathcal{H}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int_0^{t_2-t_1} T c_{\alpha_1} \psi_{\alpha_1}(\xi_1) \cdots c_{\alpha_n} \psi_{\alpha_n}(\xi_n) \, d\xi_1 \cdots d\xi_n$$

$$= e^{-i(t_2-t_1)\mathcal{H}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} c_{\alpha_1} \cdots c_{\alpha_n} \int_{t_1}^{t_2} T \psi_{\alpha_1}(\xi_1 - t_1) \cdots \psi_{\alpha_n}(\xi_n - t_1) \, d\xi_1 \cdots d\xi_n$$

$$= e^{-i(t_2-t_1)\mathcal{H}} e^{-it_1\mathcal{H}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} c_{\alpha_1} \cdots c_{\alpha_n} \int_{t_1}^{t_2} d\xi_1 \cdots d\xi_n \, T \psi_{\alpha_1} \cdots \psi_{\alpha_n} \cdot e^{-it_1\mathcal{H}}$$

woraus sich dei Behauptung durch Bildung von Matrixelementen ergibt. Der exakte Beweis dieser Äquivalenz, sowie der offenkundigen Unitarität und damit Beschränktheit der Produktdarstellung (2.18) erfordert sehr

tiefliegende Sätze aus der Funktionalanalysis und wurde von SOHR [21] geliefert.
Von Interesse ist vielleicht noch eine Darstellung des H. O. in funktionalen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die eine gewisse Analogie zu den Hermitefunktionalen zeigt (vgl. Abschnitt 4. 3).

Man kann nämlich den H. O. funktional so formulieren, daß die q. m. Relationen korrespondenzmäßig übertragen und zudem die von STUMPF und Mitarbeitern fast ausschließlich verwendeten $T_{0m}(j_1 j_2)$ ausgezeichnet werden. Zu diesem Zweck definieren wir die folgenden funktionalen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

(2.20)

$$A^-(j_1 j_2, t) = \frac{\omega}{\sqrt{2\omega}} \frac{\delta}{i\delta j_1(t)} + \frac{i}{\sqrt{2\omega}} \frac{\delta}{i\delta j_2(t)} + \int d\xi\, j_\xi(\xi)\left(-\frac{i\omega}{\sqrt{2\omega}} F\binom{\xi\, t}{\xi\, 1} + \frac{1}{\sqrt{2\omega}} F\binom{\xi\, t}{\xi\, 2}\right)$$

$$A^+(j_1 j_2, t) = \frac{\omega}{\sqrt{2\omega}} \frac{\delta}{i\delta j_1(t)} - \frac{i}{\sqrt{2\omega}} \frac{\delta}{i\delta j_2(t)} + \int d\xi\, j_\xi(\xi)\left(\frac{i\omega}{\sqrt{2\omega}} \overline{F\binom{\xi\, t}{\xi\, 1}} - \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \overline{F\binom{\xi\, t}{\xi\, 2}}\right)$$

Man überzeugt sich leicht von den Beziehungen:
(2.21)

$$(A^-)^+ = A^+ \qquad \text{d.h. hermitesch konjugiert}$$

$$A^-(j_1 j_2, 0)\, T_{0m}(j_1 j_2) = \sqrt{m}\; T_{0,m-1}(j_1 j_2)$$

$$A^+(j_1 j_2, 0)\, T_{0m}(j_1 j_2) = \sqrt{m+1}\; T_{0,m+1}(j_1 j_2)$$

$$T_{0m}(j_1 j_2) = \frac{1}{\sqrt{m!}}\left[A^+(j_1 j_2, 0)\right]^m T_{00}(j_1 j_2)$$

$$\left[A^-(j_1 j_2, 0), A^+(j_1 j_2, 0)\right] = 1$$

Die Formeln von 1.1 lassen sich dann wie folgt übertragen:

(2.22) **Ortsoperator** $\longrightarrow \quad Q(j_1 j_2) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(A^+ + A^-)$

(in Heisenbergdarstellung)

Impulsoperator $\longrightarrow \quad P(j_1 j_2) = \frac{i\omega}{\sqrt{2\omega}}(A^+ - A^-)$

Hamiltonoperator $\longrightarrow \quad \mathcal{H}(j_1 j_2) = \mathcal{H}(j_1 j_2, 0)$

$$= \frac{1}{2}(\omega^2 Q^2 + P^2)$$

Kommutator $\longrightarrow \quad \left[Q(j_1 j_2, 0), P(j_1 j_2, 0)\right]_- = i\,\mathbf{1}$

Kapitel 3

Funktionalgleichungen beim H.O.

3.1 Zur Aufstellung von Funktionalgleichungen

Insbesondere für die T-Funktionale werden Funktionalgleichungen aufgestellt.-Natürlich hätte man keinen praktischen Gewinn erzielt, wenn man alle Erzeugenden Funktionale auf die umständliche q.m. Art von Kap. 2 berechnen müßte, da ja die Schrödingergleichung des Systems vorher gelöst sein muß. Doch ist es möglich, von der Schrödingergleichung unabhängige Differential- und Integralgleichungen für unsere Funktionale abzuleiten und zu behandeln.

Für den Anharmonischen Oszillator ist das in einer Reihe von Arbeiten von STUMPF/SCHULER [15, 17, 18] ausführlich dargestellt worden. SOHR [20] hat die Ableitung der Funktionalgleichungen auf verschiedene q.m. Systeme verallgemeinert. Bevor wir ihre Ergebnisse in zwei Sätzen zusammenfassen, soll ausdrücklich betont werden, daß die Kenntnis etwa der Energieeigenfunktionale $T_{mn}(j_1 j_2)$ mindestens ebensoviel Information über ein q.m. System hergibt, wie die Wellenfunktionen dieses Systems in der Schrödingertheorie. Dazu macht man einen Übergang zum sog. einzeitigen Fall nach MAISON/STUMPF [11], für den die Behauptung schon von WAGNER [28] und MAISON [10] bewiesen wurde. Es sei daran erinnert, daß die τ -Funktionen von 1. Ordnung

$$\tau^{1}_{mn}(t) = \langle m | \psi_{\alpha}(t) | n \rangle$$

eine Darstellung der Heisenbergoperatoren q (t), p (t) liefern !

Satz 1

Das physikalische System sei durch seine Bewegungsgleichungen, die kanonischen Gleichungen:

(3.1)

$$\frac{d}{dt}\psi_\alpha(t) = \sum_{k=0}^{m} B_{\alpha\alpha_1\cdots\alpha_k}\psi_{\alpha_1}(t_1)\cdots\psi_{\alpha_k}(t_k)$$

und die kanonische Kommutatorrelation:

(3.2)

$$\left[\psi_\alpha(t),\psi_\beta(t)\right]_- = A_{\alpha\beta}\,1$$

$$(A) = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

gegeben. Dann erhält man die Funktionalgleichungen für das Erzeugende Funktional

(3.3)

$$T_{ab}(j_1 j_2) = \langle a\,|\,T e^{i\int dt\,\psi_\alpha(t)\,j_\alpha(t)}\,|\,b\rangle$$

indem man ersetzt:

(3.4)

$$\frac{d}{dt}\psi_\alpha(t) \longrightarrow \left(\frac{d}{dt}\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} - i A_{\alpha\beta} j_\beta(t)\right) T_{ab}(j_1 j_2)$$

$$\psi_{\alpha_1}(t)\cdots\psi_{\alpha_k}(t) \longrightarrow \lim_{t_1>t_2>\cdots>t_k\Rightarrow t} \frac{\delta^k}{i\delta j_{\alpha_1}(t_1)\,i\delta j_{\alpha_2}(t_2)\cdots i\delta j_{\alpha_k}(t_k)}\,T_{ab}(j_1 j_2)$$

Damit entstehen aus (3.1) und (3.2) funktionale Bewegungsgleichungen:

(3.5)

$$\left(\frac{d}{dt}\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} - i A_{\alpha\beta} j_\beta(t)\right) T_{ab}(j_1 j_2) = \sum_{k=0}^{m} B_{\alpha\alpha_1\cdots\alpha_k} \lim_{t_1 \to t_2 \to t} \frac{\delta^k}{i\delta j_{\alpha_1}(t_1)\cdots i\delta j_{\alpha_k}(t_k)} T_{ab}(j_1 j_2)$$

sowie die funktionale Quantisierungsbedingung:

(3.6)

$$\lim_{t_1 > t_2 \to t} \left(\frac{\delta^2}{i\delta j_{\alpha_1}(t_1) i\delta j_{\alpha_2}(t_2)} - \frac{\delta^2}{i\delta j_{\alpha_2}(t_1) i\delta j_{\alpha_1}(t_2)}\right) T_{ab}(j_1 j_2) = A_{\alpha_1\alpha_2} T_{ab}(j_1 j_2)$$

Beweis:

Durch Differentiation des zeitgeordneten Produktes zeigt man zunächst (vgl. STUMPF/SCHULER [17])

$$\frac{d}{dt} T\psi_1 \cdots \psi_n \psi_\alpha(t) = T\psi_1 \cdots \psi_n \frac{d}{dt}\psi_\alpha(t) + \sum_{k=1}^{n} A_{\alpha\alpha_k} \delta(t - t_k)\, T\psi_1 \cdots [\psi_k] \cdots \psi_n$$

Davon lassen sich zwei Terme sofort funktional fassen:

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta}{i\delta j_\mu(t)} T(j_1 j_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n\, j_1 \cdots j_n \frac{d}{dt} T\psi_1 \cdots \psi_n \psi_\alpha(t)$$

$$i A_{\alpha\beta} j_\beta(t) T(j_1 j_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n\, j_1 \cdots j_n \sum_{k=1}^{n} A_{\alpha\alpha_k} \delta(t - t_k)\, T\psi_1 \cdots [\psi_k] \cdots \psi_n$$

Die Relation

$$T\psi_1 \cdots \psi_n \frac{d}{dt}\psi_\alpha(t) = \sum_{k=0}^{n} B_{\alpha\beta_1\cdots\beta_k} \lim_{s_1 \to s_k \to s} T\psi_1 \cdots \psi_n \psi_\alpha(s_1) \cdots \psi_{\beta_k}(s_k)$$

bzw.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n\, j_1 \cdots j_n\, T\psi_1 \cdots \psi_n \frac{d}{dt}\psi_\alpha(t) = \sum_{k=0}^{\infty} B_{\alpha\beta_1\cdots\beta_k} \lim_{s_1 \to s_k \to s} \frac{\delta^k}{i\delta j_{\beta_1}(s_1) \cdots i\delta j_{\beta_k}(s_k)} T(j_1 j_2)$$

kann bereits am folgenden einfachen Beispiel demonstriert werden:

$$\lim_{s_1>s_2\Rightarrow s} T\psi_{\lambda_1}\cdots\psi_{\lambda_n}\psi_{\beta_1}(s_1)\psi_{\beta_2}(s_2) = \sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_n)} G_{\lambda_1\lambda_2}\, G_{\lambda_3\lambda_4}\cdots \lim_{s_1>s_2\Rightarrow s} \Theta(s_1-s_2)\,\Theta_{\lambda_{k+1}\lambda_k}\cdot\Theta_{\lambda_{n-1}\lambda_n}\cdot$$

$$\cdot\,\psi_{\lambda_1}\cdots\psi_{\lambda_k}\psi_{\beta_1}(s)\psi_{\beta_2}(s)\,\psi_{\lambda_{k+1}}\cdots\psi_{\lambda_n} = T\psi_{\lambda_1}\cdots\psi_{\lambda_n}(\psi_{\beta_1}(s)\psi_{\beta_2}(s))$$

Alle anderen Anordnungen der Argumente $(t_{\lambda_1}\cdots t_{\lambda_n} s_1 s_2)$ kommen nämlich im $\lim_{s_1>s_2\Rightarrow s}$ nicht vor, weil entweder die Bedingung $s_1>s_2$ verletzt wird oder aber eines der Θ_{λ_k} unzulässig eingeschränkt wird, z.B. bei $s_1>t_{\lambda_k}>s_2\Rightarrow s$. Mit diesem Beispiel wird auch leicht die Quantenbedingung übertragen. q. e. d.

Beim H.O. lauten die Bewegungsgleichungen:

(3.7 a)

$$\frac{d}{dt}p(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} = -\omega^2 q(t)$$

$$\frac{d}{dt}q(t) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = p(t)$$

bzw. in "spinorieller" Schreibweise:

(3.7 b)

$$\frac{d}{dt}\psi_\alpha(t) = B_{\alpha\beta}\psi_\beta(t) \quad ,\alpha=1,2$$

$$(B_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix}$$

Daher erhalten wir folgende funktionale Bewegungsgleichungen:

(3.8)

$$\left(\frac{d}{dt}\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} - A_{\alpha\beta}j_\beta(t)\right)T_{ab}(j_1j_2) = B_{\alpha\beta}\frac{\delta}{i\delta j_\beta(t)}T_{ab}(j_1j_2)$$

wozu die Quantenbedingung (3.6) unverändert hinzukommt.

Die Wickregeln gestatten es uns, beim H.O. auch für die S- und N-Funktionale Bewegungsgleichungen abzuleiten. Durch funktionale Differentiation von (1.19) erhält man:

$$\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} T(j_1 j_2) = e^{-\frac{i}{2}(j F j)} \left(\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} + i \int F\binom{t\xi}{\alpha\xi} j_\xi(\xi) \right) N(j_1 j_2)$$

$$\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} T(j_1 j_2) = e^{-\frac{i}{2}(j\, \mathrm{Im} F j)} \left(\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} - \int \mathrm{Im}\, F\binom{t\xi}{\alpha\xi} j_\xi(\xi) \right) S(j_1 j_2)$$

Einsetzen in die Bewegungsgleichung (3.8) für T ($j_1 j_2$) liefert:

(3.9) $$\left(\frac{d}{dt} \frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} - B_{\alpha\beta} \frac{\delta}{i\delta j_\beta(t)} \right) \begin{Bmatrix} N(j_1 j_2) \\ S(j_1 j_2) \end{Bmatrix} = 0$$

denn sowohl die Zweipunktfunktion F als auch (i JmF) genügen der charakteristischen Differentialgleichung:

(3.10)
$$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta} \right) F\binom{t\xi}{\beta\xi} - A_{\alpha\xi}\, \delta(t-\xi) = 0$$

so daß der Term

$$\int d\xi \left(\frac{d}{dt} F\binom{t\xi}{\alpha\xi} - B_{\alpha\beta} F\binom{t\xi}{\beta\xi} \right) j_\xi(\xi) - A_{\alpha\xi}\, j_\xi(\xi)$$

verschwindet. Die zweiten Ableitungen der S- und N-Funktionale sind im Gegensatz zu den T-Funktionalen im $\lim_{s_1 > s_2 \to s}$ stetig, so daß man keine Kommutatorrelation erhält. Dieses Ergebnis ist eine Folge der Unstetigkeit der Zweipunktfunktion:

(3.11) $$\lim_{s_1>s_2\to s} \left(F\binom{s_1 s_2}{\alpha_1 \alpha_2} - F\binom{s_2 s_1}{\alpha_2 \alpha_1} \right) = A_{\alpha_1 \alpha_2}$$

Der Satz 1 gestattet es, Bewegungsgleichungen und Quantisierungsbedingung für die allgemeinen $T_{ab}(j_1 j_2)$ -Funktionale aufzustellen. Der folgende Satz 2 macht dagegen eine wichtige Aussage über die (Energie)-eigenfunktionale eines Systems, vgl. auch MAISON/STUMPF [11].

Satz 2

Es handle sich um ein konservatives q.m. System, dessen Energiezustände $|m\rangle$, $m = 0,1,\cdots$ ein vollständiges System von Hilbertraumvektoren bilden. Dann genügen die Energieeigenfunktionale $T_{mm'}(j_1 j_2)$, $S_{mm'}(j_1 j_2)$, $N_{mm'}(j_1 j_2)$ einer funktionalen Integrodifferentialgleichung:

(3.12) $$\int dt\, j_\alpha(t) \frac{d}{dt} \frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} T_{mm'}(j_1 j_2) = (E_m - E_{m'})\, T_{mm'}(j_1 j_2)$$

wobei E_m Energieeigenwert im Zustand $|m\rangle$ ist.

Beweis

Aus den angegebenen Voraussetzungen ergibt sich in bekannter Weise:

$$\frac{d}{dt} \psi_\alpha(t) = i \left[\mathcal{H}(\psi), \psi_\alpha(t) \right]_- \quad , \quad \mathcal{H}(\psi) \text{ ist der Hamiltonoperator}$$

$$\frac{d}{dt} \langle m | \psi_\alpha(t) | m' \rangle = i (E_m - E_{m'}) \langle m | \psi_\alpha(t) | m' \rangle$$

Für die Operatorprodukte erhält man daraus:

$$\sum_{j=n}^{n} \frac{\partial}{\partial t_j} \langle m | \psi_\alpha \cdots \psi_\omega | m' \rangle = i (E_m - E_{m'}) \langle m | \psi_\alpha \cdots \psi_\omega | m' \rangle$$

Bei den T-Produkten ist etwas Vorsicht angebracht:

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial t_j} T\psi_1 \cdots \psi_n = \sum_{j=1}^{n} T\psi_1 \cdots \frac{\partial}{\partial t_j} \psi_j(t_j) \cdots \psi_n + \sum_{j=1}^{n} \sum_{\substack{k=1 \\ j \neq k}}^{n} A_{\alpha_j \alpha_k} \delta(t_j - t_k)\, T\psi_1 \cdots [\psi_j \psi_k] \cdots \psi_n$$

jedoch verschwindet wegen der Antisymmetrie von $A_{\alpha\beta}$ der zweite Term. Die funktionale Übertragung von $\sum_j \partial/\partial t_j$ liefert gerade den Operator:

$$\mathbb{P}(j_1 j_2) := \int dt\, j_\alpha(t) \frac{d}{dt} \frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)} \qquad q.e.d.$$

Aus naheliegenden Gründen heißt (3.12) auch Translationsbedingung. Beim H.O. sind die Eigenwerte E_m der Energie bekannt, so daß die Funktionalgleichung (3.12) leicht bestätigt werden kann. Außerdem wird umgekehrt auch klar, wie man durch den Operator $\mathbb{P}(j_1 j_2)$ bei bekannten Funktionalen die Differenzen der Eigenwerte der Schrödingergleichung erhält.

3.2 Zur Lösung der Funktionalgleichungen

Durch Lösen der in Nr. 3.1 aufgestellten Funktionalgleichungen werden die Resultate aus Kap. 2 beim H.O. zurückgewonnen. -
Wir wollen das folgende System von Funktionalgleichungen für den H. O. zu lösen versuchen:

(3.13. a)

$$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta}\right) \frac{\delta}{i\delta j_\beta(t)} T_{mm'}(j_1 j_2) = i A_{\alpha\beta} j_\beta(t)\, T_{mm'}(j_1 j_2)$$

b)

$$\lim_{t_1>t_2\to t}\left(\frac{\delta^2}{i\delta j_{\alpha_1}(t_1)\,i\delta j_{\alpha_2}(t_2)}-\frac{\delta^2}{i\delta j_{\alpha_2}(t_1)\,i\delta j_{\alpha_1}(t_2)}\right)T_{mm'}(j_1j_2)=A_{\alpha_1\alpha_2}T_{mm'}(j_1j_2)$$

c)

$$\int dt\, j_\alpha(t)\frac{d}{dt}\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)}\,T_{mm'}(j_1j_2)=(E_m-E_{m'})\,T_{mm'}(j_1j_2)$$

Zunächst sei daran erinnert, daß wir mit Hilfe der Schrödingertheorie in Kap. 2 bereits Ausdrücke für die $T_{mm'}(j_1j_2)$ berechnet haben. Durch Einsetzen in das obige System stellen wir fest, daß mit diesen Funktionalen das System (3.13) gelöst wird, so daß die Existenz von Lösungen und damit die Lösbarkeit des Gleichungssystems gesichert ist. Die Überlegungen der vorigen Nummer legen folgenden Ansatz nahe:

(3.14)

$$T_{mm'}(j_1j_2)=e^{-\frac{i}{\hbar}(jQj)}\,\phi_{mm'}(j_1j_2)$$

mit

$$(jQj)=\int d\xi\,d\eta\, j_\sigma(\xi)\,Q_{\sigma\varrho}(\xi-\eta)\,j_\varrho(\eta)$$

und symmetrischem Q.

Unter der Annahme, daß $\phi(j_1j_2)$ = const. (j_1j_2) eine Lösung ist (was auch (3.13 c) folgt), zerfällt (3.13) in getrennte Gleichungssysteme für Q und $\phi_{mm'}$:

(3.15)

$$\left(\delta_{\alpha\beta}\frac{d}{dt}-B_{\alpha\beta}\right)Q_{\beta\varrho}(t)-A_{\alpha\varrho}\,\delta(t)=0$$

$$\lim_{t\to 0_+}\left(Q_{\alpha_1\alpha_2}(t)-Q_{\alpha_2\alpha_1}(t)\right)=A_{\alpha_1\alpha_2}$$

(3.16)

$$\left(\delta_{\alpha\beta}\frac{d}{dt} - \mathcal{B}_{\alpha\beta}\right)\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)}\,\Phi_{nn'}(j_1 j_2) = 0$$

$$\int dt\, j_\alpha(t)\frac{d}{dt}\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)}\,\Phi_{nn'}(j_1 j_2) = (E_n - E_{n'})\,\Phi_{nn'}(j_1 j_2)$$

Die Differentialgleichung in (3.15) läßt sich durch Fouriertransformation leicht lösen, allerdings muß man beachten, daß es sich bei der gesuchten Matrix $Q_{\alpha\beta}(t)$ um Distributionen handelt, so daß

(3.17)
$$\tilde{Q}_{\alpha\beta}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipt}\, Q_{\alpha\beta}(t)\, dt$$

auch wieder als verallgemeinerte Funktionen aufzufassen sind. Demgemäß berechnen wir:

(3.18)
$$\left(\tilde{Q}_{\alpha\beta}(p)\right) = \frac{1}{p^2-\omega^2}\begin{pmatrix} i & p \\ -p & i\omega^2 \end{pmatrix}$$

und deuten $\frac{1}{p^2-\omega^2}$ als einen Feynman-Nenner $\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{p^2-\omega^2+i\varepsilon}$

Nach Rücktransformation von (3.18) ergibt sich dann für Q genau die Zweipunktfunktion F des H.O. nach Formel (1.16). Eine strenge Begründung des Vorgehens findet man in SCHEERER [14] auf der Grundlage der Distributionstheorie, wobei die auftretenden freien Konstanten durch physikalische Randbedingungen festgelegt werden. Die "Quantenbedingung" aus (3.15) bestätigt dann nur, daß Q eine Greenfunktion ist.

Wir wollen nun die Funktionalgleichungen (3.16) lösen, indem wir die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung in der Form einer Volterra-Reihe suchen:

(3.19)

$$\Phi(j_1 j_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n \, \varphi^n(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_n}) \, j_1 \cdots j_n$$

wobei die φ^n ohne Einschränkung völlig symmetrisch in den Argumenten sind, und dann die Translationsbedingung (bzw. Eigenwertgleichung) zur weiteren Einschränkung der φ^n benützen. In der reellen Funktionentheorie entspricht der Ansatz (3.19) einer Weierstraß-Approximation durch Polynome und ist nur in solchen Funktionenräumen zulässig, für welche die lineare Abschließung der Potenzen x^n dicht liegt. Wir betrachten daher nur Lösungsfunktionale auf einem Unterraum (etwa dem der stetigen beschränkten Funktionale) des vollen Funktionalraumes über einer gegebenen Funktionenklasse (etwa $j(t) \in \mathcal{S}$). Die Berechtigung dazu leiten wir aus der Definition des Erzeugenden Funktionals ab.
Einsetzen von $\Phi(j_1 j_2)$ in (3.16) und Koeffizientenvergleich der j-Potenzen verschafft uns eine Differentialgleichung für die φ^n -Funktionen :

(3.20) $$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - \mathcal{B}_{\alpha\beta}\right) \varphi^{n+1}(t_\beta t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_n}) = 0 \quad \text{für } n = 0,1,2 \cdots$$

Für $n = 0$ erhalten wir die zwei linear unabhängigen (Fundamental-) Lösungen:

(3.21)

$$z^1(t_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (-i\omega)^{\alpha-1} e^{-i\omega t}$$

$$z^2(t_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (i\omega)^{\alpha-1} e^{i\omega t} = \overline{z^1(t_\alpha)}$$

aus denen sich dann φ^1 zusammensetzt.

$$\varphi^1(^{t}_{\alpha}) = c^1_1 z^1(^{t}_{\alpha}) + c^1_2 z^2(^{t}_{\alpha})$$

Wegen der vollständigen Symmetrie der φ^n läßt sich dieses Ergebnis sofort verallgemeinern:

(3.22)

$$\varphi^n(^{t_1 \dots t_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}) = \sum_{(\lambda \dots \lambda_n)} \sum_{k=0}^{n} c^n_k \, z^2(^{t_{\lambda_1}}_{\alpha_{\lambda_1}}) \cdots z^2(^{t_{\lambda_k}}_{\alpha_{\lambda_k}}) \, z^1(^{t_{\lambda_{k+1}}}_{\alpha_{\lambda_{k+1}}}) \cdots z^1(^{t_{\lambda_n}}_{\alpha_{\lambda_n}})$$

Die zugehörigen Funktionale sind dann für n = 0:

$$\begin{aligned} Z^1(_{j_1 j_2}) &= i \int dt \, z^1(^{t}_{\alpha}) \, 1_\alpha(t) \\ &= \tfrac{i}{\sqrt{2\omega}} \int e^{-i\omega t} j_1(t)\, dt + \tfrac{\omega}{\sqrt{2\omega}} \int e^{-i\omega t} j_2(t)\, dt \\ &= N_{01}(j_1 j_2) \\ Z^2(_{j_1 j_2}) &= -\overline{Z^1(_{j_1 j_2})} \\ &= N_{10}(j_1 j_2) \end{aligned}$$

Für n > 0 ergeben sich Summen und Produkte von Potenzen von z^1 und z^2. Zur Bestimmung der freien Konstanten c^n_k berücksichtigen wir die Translationsbedingung in der Gestalt:

(3.23)

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial t_j} \varphi^n_{m \dots m'}(^{t_1 \dots t_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}) = i (E_m - E_{m'}) \, \varphi^n_{m \dots m'}(^{t_1 \dots t_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_n})$$

$$=: i\omega \, \varepsilon_{m \dots m'} \, \varphi^n_{m \dots m'}(^{t_1 \dots t_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_n})$$

die aus dem Beweis von Satz 2 der vorigen Nummer folgt. Setzen wir (3.22) in (3.23) ein, so erhalten wir die folgende Eigenwertgleichung:

(3.24)
$$\left[\varepsilon_{nn'} - (2k-n)\right] c_k^n(n,n') = 0 \quad \text{für alle } n=0,1,2\cdots \text{ und } k=0,1,\cdots n$$

Zu festem Eigenwert $\varepsilon_{nk} = 2k-n$ gehören also alle φ^n-Funktionen, für die

$$n \geq |\varepsilon_{nk}| \quad \text{und} \quad c_k^n = \left\{ \begin{array}{ll} \text{beliebig} & \text{für } k = \frac{1}{2}(n+\varepsilon_{nk}) \\ 0 & \text{sonst} \end{array} \right\}$$

Das liefert die folgenden Funktionale zum Eigenwert $\varepsilon = \varepsilon_{nk}$:
(3.25)

$$\Phi_\varepsilon(j_1 j_2) = \sum_{n=|\varepsilon|}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n \, j_{t_1} \cdots j_{t_n} \sum_{(\lambda_1 \cdots \lambda_n)} c_k^n \, Z^2(t_{\alpha_{\lambda_1}}) \cdots Z^2(t_{\alpha_{\lambda_k}}) Z^1(t_{\alpha_{\lambda_{k+1}}}) \cdots Z^1(t_{\alpha_{\lambda_n}})$$

$$= \sum_{n \geq |\varepsilon|} c_k^n \left[Z^2(j_1 j_2)\right]^k \cdot \left[Z^1(j_1 j_2)\right]^{n-k}$$

wobei $k = \frac{1}{2}(n+\varepsilon)$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} \left[Z^1(j_1 j_2)\right]^{-\varepsilon} \cdot \sum_{n \geq |\varepsilon|} c^n_{\frac{n+\varepsilon}{2}} \, (-j \, \mathrm{Re}\, F_j)^{\frac{n+\varepsilon}{2}} & \varepsilon \leq 0 \\ \left[Z^2(j_1 j_2)\right]^{\varepsilon} \cdot \sum_{n \geq |\varepsilon|} c^n_{\frac{n+\varepsilon}{2}} \, (-j \, \mathrm{Re}\, F_j)^{\frac{n-\varepsilon}{2}} & \varepsilon \geq 0 \end{array} \right\} \text{ für}$$

Der Vergleich mit den aus der Schrödingertheorie berechneten N-Funktionalen (2.13) lehrt, daß sie lediglich Linearkombinationen von (3.25) sind. Um die noch verbleibenden freien Konstanten in (3.25) eindeutig festzulegen, kann man die Unitarität der T-Funktionale nach (2.17) fordern:

$$\sum_{m=0}^{\infty} T_{km}(j_1 j_2)\,\overline{T_{\ell m}(j_1 j_2)} = \delta_{k\ell}\,, \qquad k,\ell = 0,1,\cdots$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} \Phi_{km}(j_1 j_2)\,\overline{\Phi_{\ell m}(j_1 j_2)} = e^{(j\,\Re m F_j)}\cdot \delta_{k\ell}$$

Man erkennt ohne große Schwierigkeit, daß man ausreichend viele Gleichungen zur Verfügung hat. Jedoch soll dieses rein rechentechnische Problem hier nicht durchgeführt werden.

Der Vollständigkeit halber wollen wir die von verschiedenen Autoren verwendete Greensche Methode zur Lösung der funktionalen Bewegungsgleichungen am H.O. erörtern. Wir schreiben die Funktionalgleichung (3.5) in der Form:

(3.26)

$$\left(\delta_{\alpha\beta}\frac{d}{dt} - \mathcal{B}_{\alpha\beta}\right)\frac{\delta}{i\delta j_\beta(t)}\,T_{ab}(j_1 j_2) = \left(i A_{\alpha\beta} j_\beta(t) + \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\mathcal{B}}_{\alpha\alpha_1\cdots\alpha_k} \lim_{t_i \to t} \frac{\delta^k}{i\delta j_{\alpha_1}(t_1)\cdots i\delta j_{\alpha_k}(t_k)}\right) T_{ab}(j_1 j_2)$$

wobei wir in der Matrix $\hat{\mathcal{B}}$ noch den Term $-\mathcal{B}_{\alpha\beta}\,\delta/i\delta j_\beta(t)$ aufgenommen haben:

$$(\mathcal{B}_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix}$$

Beim H.O. vereinfacht sich (3.26) zu der Gleichung:

(3.27)

$$\left(\delta_{\alpha\beta}\frac{d}{dt} - \mathcal{B}_{\alpha\beta}\right)\frac{\delta}{i\delta j_\beta(t)}\,T_{ab}(j_1 j_2) = i A_{\alpha\beta} j_\beta(t)\cdot T_{ab}(j_1 j_2)$$

Definieren wir jetzt folgende Greenfunktion:

(3.28)
$$\left(\delta_{\alpha\beta}\frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta}\right) G_{\beta\gamma}(t-t') = \delta_{\alpha\gamma}\,\delta(t-t')$$

so erhalten wir die Lösungen von (3.27) in der Form:

(3.29)
$$T_{ab}(j_1 j_2) = T_0(j_1 j_2)\;\phi_{ab}(j_1 j_2)$$

wobei T_0 durch die Gleichung

(3.30)
$$\frac{\delta}{i\,\delta j_\alpha(t)}\,T_0(j_1 j_2) = i\int dt\,dt'\,G_{\alpha\gamma}(t-t')\,A_{\gamma\beta}\,j_\beta(t')\cdot T_0(j_1 j_2)$$

bestimmt wird und ϕ_{ab} Lösungen der homogenen Gleichung sind:

(3.16)
$$\left(\delta_{\alpha\beta}\frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta}\right)\frac{\delta}{i\,\delta j_\beta(t)}\,\phi_{ab}(j_1 j_2) = 0$$

Die Differentialgleichung (3.30) hat die bekannte Lösung $e^{-\frac{1}{2}(j\,G\,A\,j)}$ während ϕ_{ab} von (3.16) bereits oben berechnet wurden. Es bleibt nur noch die Berechnung der Greenfunktion aus Gleichung (3.28). Durch Fouriertransformation und Feynman-Integration erhalten wir ähnlich wie in Abschnitt 3.2 den Integralkern:

(3.31)
$$\left(G_{\alpha\beta}(t-t')\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \varepsilon(t-t') & \frac{i}{\omega} \\ -i\omega & \varepsilon(t-t') \end{pmatrix} e^{-i\omega|t-t'|}$$

und stellen leicht die folgende Relation fest:

(3.32)

$$G_{\alpha\rho}(t-t')\,A_{\rho\beta} = F\binom{t\,t'}{\alpha\,\beta}$$

so daß wir zu genau denselben Lösungen wie oben gelangen.

3.3 Symmetrisierung der Funktionalgleichungen

Es werden Bedingungen für die eindeutige Symmetrisierung der Funktionalgleichungen gesucht. -
Weil die Gleichungen (3.13) gegenüber einer Verschiebung des Parameters t invariant sind, haben bereits SCHULER/STUMPF [18] versuchsweise das System von Funktionalgleichungen symmetrisiert und sich die Frage gestellt, ob das neue Gleichungssystem dieselben Lösungen wie das alte hat.
SOHR [20] hat z. B. die spezielle "Ausschmierung" $\sum_{\alpha} \ldots$ in der Gestalt einer funktionalen Schrödingergleichung für $T_{mm'(j_1 j_2)}$ geschrieben:

(3.33)

$$\frac{1}{i}\,\mathbb{D}_{(j_1 j_2)}\,T_{mm'(j_1 j_2)} = \int dt\, j_{\alpha}(t) \sum_{k=0}^{m} B_{\alpha\alpha_1\ldots\alpha_k} \lim_{t_1,\ldots,t_k \to t} \frac{\delta^k}{\delta j_{\alpha_1}(t_1)\ldots\delta j_{\alpha_k}(t_k)}\, T_{mm'(j_1 j_2)}$$

$$=: \mathrm{IH}_{(j_1 j_2)}\,T_{mm'(j_1 j_2)}$$

Der Operator $\mathbb{D}$ auf der linken Seite ist eine Ableitung, die in der Funktionalanalysis benutzt wird:

(3.34)

$$\mathbb{D}_{(h_1 h_2)}\,T_{(j_1 j_2)} := \int dt \left(h_1(t) \frac{\delta}{\delta j_1(t)} + h_2(t) \frac{\delta}{\delta j_2(t)} \right) T_{(j_1 j_2)}$$

Insbesondere erhält man nach partieller Integration:

(3.35)

$$\mathbb{D}(j_1' j_2') = \int dt \left(j_1'(t) \frac{\delta}{\delta j_1(t)} + j_2'(t) \frac{\delta}{\delta j_2(t)} \right) T(j_1 j_2)$$

$$= i \int dt \left(j_1(t) \frac{d}{dt} \frac{\delta}{i \delta_{j_1}(t)} + j_2(t) \frac{d}{dt} \frac{\delta}{i \delta_{j_2}(t)} \right)$$

$$= i \, \mathbb{P}(j_1 j_2)$$

Für "stationäre" Funktionale, d. h. Eigenfunktionale ergibt sich entsprechend eine stationäre "Schrödingergleichung":

(3.36)

$$\mathbb{H}(j_1 j_2) T_{mm'}(j_1 j_2) = (E_m - E_{m'}) T_{mm'}(j_1 j_2)$$

Leider kann man bereits beim H. O. nachweisen, daß die Lösungsmannigfaltigkeit von (3.36) (zusammen mit der Quantenbedingung) jedenfalls größer ist als die des ursprünglichen Systems (3.13). Man hat:

$$\mathbb{H}_{\text{x.o.}}(j_1 j_2) = \int dt \, j_\alpha(t) \, \mathcal{B}_{\alpha\beta} \frac{\delta}{i \delta_{j_\beta}(t)}$$

Natürlich sind (3.25) ebenfalls Lösungen unseres jetzigen Problems; aber zusätzlich erhält man noch einen Faktor $f(jQj)$, wobei f eine gebrochen rationale Funktion ihres Argumentes ist und die quadratische Form (jQj) mit dem symmetrischen Kern Q durch folgende zwei Bedingungen festgelegt ist:

$$\mathbb{P}(j_1 j_2) \, (jQj) = 0$$

$$\mathbb{H}_{\text{H.O.}}(j_1 j_2) \, (jQj) = 0$$

Dadurch wird jedoch der Integralkern $Q\binom{\xi\ \eta}{\alpha\ \beta}$ nur in folgender Weise bestimmt:

$$Q = \begin{pmatrix} q_1(\xi-\eta) & q_2(\xi-\eta) \\ -q_2(\xi-\eta) & \omega^2 q_1(\xi-\eta) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} q_1(x) = q_1(-x) \\ q_2(x) = -q_2(-x) \end{cases}$$

Auch die Quantenbedingung bringt uns nicht viel weiter, die Zweipunktfunktion F ist nur eine von vielen möglichen Realisierungen.

Ergebnis: Benutzt man die "funktionale Schrödingergleichung" (3.36), so müssen noch weitere Randbedingungen für die Lösungsfunktionale gefunden werden (Zudem ist diese Symmetrisierung auch nicht relativistisch invariant, also nicht auf die Spinortheorie anwendbar).

Wir wollen nun die verschiedenen Möglichkeiten zur Symmetrisierung der Funktionalgleichungen (3.13) beim H.O. systematisch untersuchen. Dazu ziehen wir zweckmäßig die mittels Greenfunktion integrierte (inhomogene) Gleichung (3.30) heran, deren Lösung mit $T_0(j_1 j_2) = \text{const.}\ e^{-\frac{i}{\hbar}(j F j)}$ bekannt ist. Ähnlich sind auch STUMPF/SCHULER [18] und SCHULER [15] beim Anharmonischen Oszillator vorgegangen, wobei sie als "Ausschmierungsoperator" verwendet haben:

(3.37) $$S(j_1 j_2) = \sum_{\alpha=1}^{2} \int dt\, dt' \left(r_{\alpha\beta}(t-t')\, j_\beta(t') + s_{\alpha\beta}(t-t') \frac{\delta}{i\,\delta j_\beta(t')} \right)$$

o. E. mit symmetrischem r und s

Mit diesem Operator lautet unsere Gleichung:

(3.38) $$\int dt\, dt' \Big\{ s_{\alpha\beta}(t-t') \frac{\delta^2}{i\delta j_\alpha(t)\, i\delta j_\beta(t')} + \Big(r_{\alpha\beta}(t-t') - i \int d\xi\, F_{\alpha\varsigma}(t-\xi)\, s_{\varsigma\beta}(\xi-t') \Big) j_\alpha(t) \frac{\delta}{i\delta j_\beta(t')}$$

$$- i \int d\xi\, r_{\alpha\varsigma}(t-\xi)\, F_{\varsigma\beta}(\xi-t')\, j_\alpha(t) j_\beta(t') - s_{\alpha\beta}(t-t')\, F_{\beta\alpha}(t'-t) \Big\}\, T_0(j_1 j_2) = 0$$

Machen wir die funktionale Transformation

$$\overline{T}_o(j_1 j_2) = e^{-\frac{i}{\hbar}(jF)}\,\phi_o(j_1 j_2)$$

so entsteht aus (3.38) die Funktionalgleichung

(3.39)

$$\int dt\,dt' \left\{ s_{\alpha\beta}\,\frac{\delta^2}{i\delta j_\alpha(t)\, i\delta j_\beta(t')} + \left(r_{\alpha\beta}(t-t') + i\int d\xi\, F_{\alpha\varsigma}(t-\xi)\, s_{\varsigma\beta}(\xi-t') \right) j_\alpha(t)\,\frac{\delta}{i\delta j_\beta(t')} \right\} \phi_o(j_1 j_2) = 0$$

welche jedenfalls (nach Voraussetzung) die Lösung $\phi_o = \text{const.}$ besitzt. Wenn man die ursprüngliche Gleichung symmetrisiert, muß man natürlich fordern, daß die Lösungsgesamtheit unverändert bleibt, d.h. daß (3.30) und (3.38) dieselben Lösungen haben. Insbesondere darf (3.39) nur durch eine Konstante gelöst werden, wodurch wir die Integralkerne r und s bestimmen können. Dazu setzen wir $\phi_o(j_1 j_2)$ zunächst linear an:

$$\phi_o(j_1 j_2) = i\int d\eta\, \varphi\binom{\eta}{\sigma}\, j_\sigma(\eta)$$

$$\frac{\delta \phi_o}{i\delta j_\beta(t')} = \varphi\binom{t'}{\beta}$$

Von der Gl. (3.39) bleiben nun folgende Terme übrig:

(3.40)

$$\int d\xi\; K_{\alpha\beta}(t-\xi)\,\varphi\binom{\xi}{\beta} = 0$$

$$K_{\alpha\beta}(t-\xi) := r_{\alpha\beta}(t-\xi) + i\int d\eta\, F_{\alpha\varsigma}(t-\eta)\, s_{\varsigma\beta}(\eta-\xi)$$

Damit (3.40) nur die triviale Lösung $\varphi\binom{\xi}{\beta} \equiv 0$ hat, und wegen der Symmetrie von $K_{\alpha\beta}$ muß notwendig gelten:

(3.41)

$$K_{\alpha\beta}(t-\xi) = c(t)\cdot\delta_{\alpha\beta}\cdot\delta(t-\xi)$$

Dadurch vereinfacht sich (3.39) weiter:

(3.42) $$\int dt\left\{\int dt' S_{\alpha\beta}(t-t')\frac{\delta^2}{i\delta j_\alpha(t)\, i\delta j_\beta(t')} + c(t) j_\alpha(t)\frac{\delta}{i\delta j_\alpha(t)}\right\}\phi_0(j_1 j_2) = 0$$

Auch für diese Gl. machen wir wieder einen Ansatz und zwar:

$$\phi_0(j_1 j_2) = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{i^m}{m!}\int dt_1\cdots dt_m\,\varphi^m\binom{t_1\cdots t_m}{\alpha_1\cdots\alpha_m} j_1\cdots j_m \quad ,$$

dann ergeben sich durch Koeffizientenvergleich die folgenden Gleichungen:

(3.43) $$\int dt dt'\, S_{\alpha\beta}(t-t')\,\varphi^2\binom{t\,t'}{\alpha\,\beta} = 0$$

$$\int dt dt'\, S_{\alpha\beta}(t-t')\,\varphi^{m+2}\binom{t\,t'\,t_1\cdots t_m}{\alpha\,\beta\,\alpha_1\cdots\alpha_m} = \sum_{i=1}^{m} c(t_i)\,\varphi^m\binom{t_1\cdots t_m}{\alpha_1\cdots\alpha_m} \quad , m = 1,2,\cdots$$

die offenbar immer nichttriviale Lösungen besitzen, falls nicht:

(3.44) $$S_{\alpha\beta}(t-t') \equiv 0$$

Ergebnis:

Der Operator

(3.45) $$\mathfrak{S}(j_1 j_2) = \sum_{\alpha=1}^{2}\int dt\, c(t)\cdot j_\alpha(t)$$

ist der einzige Ausschmierungsoperator beim H.O., so daß die ursprüngliche und symmetrisierte Funktionalgleichung dieselbe Lösungsgesamtheit hat. Dabei kann man die Funktion c (t) noch frei vorgeben.

Kapitel 4

Funktionalnorm beim H.O.

4.1 Skalarprodukt im Funktionalraum

Diskutiert werden die Notwendigkeit und die Möglichkeiten, im Funktionalraum ein Skalarprodukt einzuführen. -
Wir sind an einem Punkt angelangt, wo es fast zwingend notwendig wird, ein Skalarprodukt im Raum der behandelten Funktionale zur Hand zu haben:

a) Vom theoretischen Standpunkt aus ist es wünschenswert, eine Isometrie zwischen dem q.m. Hilbertraum und der linearen Mannigfaltigkeit der Eigenfunktionale (wir betrachten im weiteren ausschließlich die $\top$ -Funktionale) herzustellen, damit man den Hilbertraum der Quantentheorie in den Funktionalraum "einbetten" und mit vertrauten mathematischen Methoden arbeiten kann.

b) Vom praktischen Standpunkt aus ist es nötig, numerische Rechenmethoden zur Lösung der Funktionalgleichung anzuwenden, wobei die Art dieser Methoden sowie alle Konverganzbetrachtungen von der Existenz einer Norm im Funktionalraum abhängen (z.B. bei der von HEISENBERG [8] vorgeschlagenen NTD-Methode oder der von STUMPF [22] vorgezogenen Methode der kleinsten Quadrate). Jede Entwicklung nach (vollständigen) Funktionalsystemen ist nur unter solchen Umständen sinnvoll.

In der Literatur werden zwei Möglichkeiten behandelt, eine Funktionalnorm einzuführen:

a) Man faßt das T-Funktional als Rechenhilfsmittel für einen Folgenvektor auf, der aus den τ -Funktionen besteht; was BEREZIN [1] für die Fock-Darstellung durchgeführt hat.

(4.1)
$$T_{mm'}(j_1|z) \quad \longleftrightarrow \quad \mathcal{T}_{mm'} = \begin{pmatrix} \tau^0_{mm'} \\ \tau^1_{mm'}(t_{\alpha_1}) \\ \vdots \\ \tau^k_{mm'}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k}) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Dann wird als Norm der folgende Ausdruck nahegelegt:

(4.2)
$$\|\mathcal{T}_{mm'}\|^2 = |\tau^0_{mm'}|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_n} \int dt_{\alpha_1} \cdots dt_{\alpha_n} \, |\tau^n_{mm'}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_n})|^2$$

Dabei ist allerdings zu beachten, daß in (4.2) die Integrale im Sinne von Riemann oder Lebesgue nicht existieren, weil wir festgestellt haben, daß die τ -Funktionen ihrer Natur nach fastperiodische Funktionen und daher nicht quadratintegrabel sind. Jedoch könnte man das fastperiodische Maß oder aber ein Lebesgue-Stieltjes-Integral verwenden.
Als Beispiel betrachten wir die normalgeordneten ς -Funktionen beim H. O.:

(4.3)
$$\varsigma^k_{on}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k}) = \delta_{kn} \sqrt{n!} \frac{1}{\sqrt{2\omega}^n} (-i\omega)^{\alpha_1 - 1 + \cdots + \alpha_n - 1} e^{-i\omega(t_1 + \cdots + t_n)}$$

$$|\varsigma^k_{on}|^2 = \delta_{kn} \sqrt{n!} \frac{1}{(2\omega)^n} \omega^{2(\alpha_1 - 1 + \cdots + \alpha_n - 1)}$$

Damit erhalten wir die Norm:

Damit erhalten wir die Norm:

$$(4.4) \quad |N_{on}|^2 = n! \left(\frac{1+\omega^2}{2\omega}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots dt_n$$

Das Integral auf der rechten Seite divergiert natürlich im Sinne von Lebesgue; setzen wir aber $dt \longrightarrow d\mu(t)$ und wählen entweder

$$d\mu(t) = e^{-\frac{1}{2}t^2} dt \qquad \text{(Lebesgue-Stieltjes-Integral mit Gaußfaktor)}$$

oder

$$\int d\mu(t) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dt \qquad \text{(fastperiodisches Maß),}$$

so konvergiert beidesmal das Integral.

b) Nehmen wir den Funktionalbegriff jedoch ernst und versuchen, damit auch numerisch zu rechnen, so müssen wir eine Normdefinition finden, welche die funktionale Abhängigkeit direkt berücksichtigt. Analog dem Normbegriff des q.m. Hilbertraumes geschieht das durch die Einführung eines Skalarproduktes und zwar mit Hilfe der sog. funktionalen Integration. Die Integration von Funktionalen ist auf die verschiedensten Arten möglich, worauf wir hier nicht näher eingehen wollen. STUMPF hat in [22] für die Integration der hier verwendeten Funktionale einen algebraischen Kalkül entwickelt, der mit feldtheoretischen Begriffen arbeitet und leicht zu handhaben ist. Schließlich konnte SOHR [20] die Äquivalenz des Kalküls mit dem Friedrichs-Shapiro-Integral nachweisen, das FRIEDRICHS [7] schon frühzeitig zur Behandlung gleichartiger Probleme entwickelt hatte.

Für unsere Zwecke genügt die folgende

Definition

Ein (nichtlineares) Funktional $T_{mm'}(j_1 j_2)$ sei in der Form

(4.5)

$$T_{mm'}(j_1 j_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \int dt_1 \cdots dt_k \; \tau^k_{mm'}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k}) \, j_{\alpha_1}(t_1) \cdots j_{\alpha_k}(t_k)$$

d.h. als Volterra-Reihe gegeben. Dann hat

(4.6)

$$\langle T_{mm'}(j_1 j_2), T_{nn'}(j_1 j_2) \rangle$$

$$= \int_{FS} \overline{T_{mm'}(j_1 j_2)} \; T_{nn'}(j_1 j_2) \; e^{-(j G j)} \, \delta j$$

$$= \sum_{k+\ell \text{ gerade}} \frac{(k+\ell)!}{k!\,\ell!\,(\frac{k+\ell}{2})!\,2^{\frac{k+\ell}{2}}} \int dt_1 \cdots dt_{k+\ell} \; \bar{G}^{-1}(t_{\alpha_1} t_{\alpha_2}) \cdots \bar{G}^{-1}(t_{\alpha_{k+\ell-1}} t_{\alpha_{k+\ell}}) \times$$

$$\times \left\{ \overline{\tau^k_{mm'}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k})} \; \tau^{k+\ell}_{nm'}(t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_{k+\ell}}) \right\}$$

die Eigenschaften eines Skalarproduktes, falls die rechte Seite existiert.

Zur Erklärung:

Das Integral ist ein sog. Friedrichs-Shapiro-Integral und der Faktor $e^{-(j G j)}$ gehört zum Integrationsmaß (Gaußmaß), es müßte also besser heißen:

$$\delta\mu(j) = e^{-(j G j)} \delta j$$

Die übrigen Symbole bedeuten:

$$S\left\{\overline{\tau^{k}_{mm'}}\ \tau^{\ell}_{nn'}\right\} =$$

Symmetrisierung aller Argumente

$$= \frac{1}{(k+\ell)!} \sum_{(\lambda_1 \cdots \lambda_{k+\ell})} \overline{\tau^{k}_{mm'}\left(t_{\alpha_{\lambda_1}} \cdots t_{\alpha_{\lambda_k}}\right)}\, \tau^{\ell}_{nn'}\left(t_{\alpha_{\lambda_{k+1}}} \cdots t_{\alpha_{\lambda_{k+\ell}}}\right)$$

$$(j G j) = \int d\xi\, d\eta\, j_\sigma(\xi)\, G\begin{pmatrix}\xi & \eta \\ \sigma & \tau\end{pmatrix} j_\tau(\eta)$$

$$\int d\eta\, G\begin{pmatrix}\xi & \eta \\ \sigma & \tau\end{pmatrix} \bar{G}\begin{pmatrix}\eta & \xi \\ \tau & \zeta\end{pmatrix} = \delta_{\sigma\zeta}\,\delta(\xi-\zeta)$$

Die rechte Seite von (4. 6) konvergiert insbesondere dann, wenn die T-Funktionale (wie beim H. O.) beschränkt sind. Dann existiert natürlich das funktionale Integral (4. 6) mit einem geeigneten Maßfaktor $e^{-(jGj)}$ sogar in dem Falle, daß das Funktional nicht als Volterra-Reihe darstellbar ist. Tatsächlich wird für beschränkte Funktionale in den neuesten Arbeiten von SOHR [21] die sog. Produktdarstellung als die geeignetere verwendet.

Zum Abschluß dieser Nummer bemerken wir, daß mit

$$\int \overline{T_{mm'(j_1 j_2)}}\, T_{nn'(j_1 j_2)}\, \delta\mu(j)$$

auch

(4. 7)

$$\langle T_{mm'(j_1 j_2)}, T_{nn'(j_1 j_2)} \rangle_A$$

$$:= \langle A(j_1 j_2)\, T_{mm'(j_1 j_2)},\ A(j_1 j_2)\, T_{nn'(j_1 j_2)} \rangle$$

$$= \int_{FS} |A(j_1 j_2)|^2\, \overline{T_{mm'(j_1 j_2)}}\, T_{nn'(j_1 j_2)}\, \delta\mu(j)$$

ein Skalarprodukt ist, wenn $A(j_1 j_2)$ ein multiplikativer Faktor ist.

4.2 Spezielle Funktionalnorm beim H.O.

Gezeigt wird die Orthonormalität der Energieeigenfunktionale des H.O. bei einem speziellen Skalarprodukt im Funktionalraum. —
Auf Grund der in Abschnitt 2.3 bewiesenen Beschränktheit der T-Funktionale kann man also bei geeignetem Integralmaß immer ein Skalarprodukt zwischen diesen Funktionalen und damit auch eine Norm definieren. Für viele Zwecke, insbesondere der Streutheorie (vgl. STUMPF [23]) ist es jedoch vorteilhaft, ein Skalarprodukt derart einzuführen, daß die $T_{mm'}(j_1 j_2)$ beim H.O. orthonormiert sind.
Um die Sache so einfach wie möglich zu gestalten, benutzen wir die Bemerkung aus Abschnitt 4.1 Gleichung (4.7), wonach auch

$$\langle T_{mm'}(j_1 j_2), T_{nn'}(j_1 j_2) \rangle_A$$

ein Skalarprodukt ist und wählen

(4.8)

$$A(j_1 j_2) = e^{\frac{1}{2}(j F_j)}$$

als multiplikativen Faktor. Dann haben wir wegen der Wickregeln nur noch

$$\langle N_{mm'}(j_1 j_2), N_{nn'}(j_1 j_2) \rangle = \delta_{mn} \delta_{m'n'}$$

(ohne Faktor) nachzuweisen. Die Aussagen dieser Nummer fassen wir wieder in einem Satz zusammen:

Satz

Wählt man als Maßfaktor

(4.9)

$$\delta\mu(j) = e^{-(jGj)}\,\delta_j$$

mit

$$(jGj) := \int d\xi\, d\eta\; j^*(\xi)\, G\begin{pmatrix}\xi & \eta\\ \xi & \eta\end{pmatrix} j(\eta)$$

$$G\begin{pmatrix}\xi & \eta\\ \xi & \eta\end{pmatrix} = g_{\sigma\sigma}\, g(\xi)\,\delta(\xi-\eta)$$

$$(g_{\sigma\sigma}) = \begin{pmatrix}\frac{1}{\omega} & 0\\ 0 & \omega\end{pmatrix}, \qquad \int \bar{g}^{-1}(\xi)\, d\xi = 1$$

dann sind die normalgeordneten Funktionale $N_{mm'}(j,j^*)$ **des H.O. orthonormiert.**

Beweis

Nach der Formel (4.6) von SOHR haben wir zu zeigen, daß

$$\sum_{k+\ell \text{ gerade}} \frac{(k+\ell)!}{k!\,\ell!\,\left(\frac{k+\ell}{2}\right)!\,2^{\frac{k+\ell}{2}}} \int dt_1 \cdots dt_{k+\ell}\; \bar{G}\begin{pmatrix}t_1 & t_2\\ \alpha_1 & \alpha_2\end{pmatrix} \cdots \bar{G}\begin{pmatrix}t_{k+\ell-1} & t_{k+\ell}\\ \alpha_{k+\ell-1} & \alpha_{k+\ell}\end{pmatrix} S\left\{\overline{\varphi^{k}_{mm'}(\alpha_1 \cdots \alpha_k)}\; \bar{\varphi}_{k+1}(t_{k+1}) \cdots \bar{\varphi}_{k+\ell}(t_{k+\ell})\right\}$$

$$= \delta_{mn}\,\delta_{m'n'}$$

Wir betrachten zunächst den einfachsten Fall m = 0, m' = m, n = 0, n' = n und berechnen:

$$\mathcal{S}\{\overline{s^{k}_{om}}\, s^{e}_{on}\} = \frac{1}{(k+e)!}\sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_{k+e})} \overline{s^{k}_{om}\left(\begin{matrix} t_{\lambda_1}\cdots t_{\lambda_k} \\ \alpha_{\lambda_1}\cdots\alpha_{\lambda_k}\end{matrix}\right)}\, s^{e}_{on}\left(\begin{matrix} t_{\lambda_{k+1}}\cdots t_{\lambda_{k+e}} \\ \alpha_{\lambda_{k+1}}\cdots\alpha_{\lambda_{k+e}}\end{matrix}\right)$$

Mit Hilfe der Formeln (2.11) aus Kap. 2 erhalten wir

$$s^{k}_{om}\left(\begin{matrix} t_1\cdots t_k \\ \alpha_1\cdots\alpha_k\end{matrix}\right) = \delta_{km}\sqrt{m!}\,(-i\omega)^{\alpha_1-1+\cdots+\alpha_m-1}\, e^{-i\omega(t_1+\cdots+t_m)}$$

$$= \delta_{km}\sqrt{m!}\; s^{1}_{o1}\left(\begin{matrix} t_1 \\ \alpha_1\end{matrix}\right)\cdots s^{1}_{o1}\left(\begin{matrix} t_m \\ \alpha_m\end{matrix}\right)$$

Mit den Fundamentallösungen z^1, z^2 der Funktionalgleichungen aus (3.21) können wir schreiben:

$$s^{1}_{o1}\left(\begin{matrix} t \\ \alpha\end{matrix}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(-i\omega)^{\alpha-1}e^{-i\omega t} = z^1\left(\begin{matrix} t \\ \alpha\end{matrix}\right)$$

$$\overline{s^{1}_{o1}\left(\begin{matrix} t \\ \alpha\end{matrix}\right)} = z^2\left(\begin{matrix} t \\ \alpha\end{matrix}\right)$$

$$\mathcal{S}\{\overline{s^{k}_{om}}\, s^{e}_{on}\} = \delta_{km}\,\delta_{en}\,\frac{\sqrt{m!\,n!}}{(m+n)!}\sum_{(\lambda_1\cdots\lambda_{m+n})} z^2\left(\begin{matrix} t_{\lambda_1} \\ \alpha_{\lambda_1}\end{matrix}\right)\cdots z^2\left(\begin{matrix} t_{\lambda_k} \\ \alpha_{\lambda_k}\end{matrix}\right) z^1\left(\begin{matrix} t_{\lambda_{k+1}} \\ \alpha_{\lambda_{k+1}}\end{matrix}\right)\cdots z^1\left(\begin{matrix} t_{\lambda_{k+e}} \\ \alpha_{\lambda_{k+e}}\end{matrix}\right)$$

Weiterhin gilt

$$\bar{G}^{-1}\begin{pmatrix} \xi & \eta \\ \varsigma & \sigma \end{pmatrix} = \bar{g}^{-1}_{\varsigma\sigma}\, \bar{g}^{-1}(\xi)\, \delta(\xi-\eta)$$

$$(\bar{g}^{-1}_{\varsigma\sigma}) = \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \frac{1}{\omega} \end{pmatrix}$$

Die einzelnen Summanden in der obigen Reihe, die nun nichts anderes als "Skalarprodukte" mit dem Gewicht $\bar{G}^{-1}$ zwischen den z^1 und z^2 sind, kann man ausintegrieren gemäß

$$\begin{aligned} \langle z^2 \mid z^1 \rangle_G &= \int dt_1 dt_2\, \bar{G}^{-1}\begin{pmatrix} t_1 & t_2 \\ \alpha_1 & \alpha_2 \end{pmatrix} \overline{z^2(t_1)}\, z^1(t_2) \\ &= \int dt_1 dt_2\, \bar{G}^{-1}\begin{pmatrix} t_2 & t_2 \\ \alpha_1 & \alpha_2 \end{pmatrix} z^1(t_1)\, z^1(t_2) \\ &= \frac{1}{2\omega}(-i\omega)^{\alpha_1-1+\alpha_2-1}\, \bar{g}^{-1}_{\alpha_1\alpha_2} \int dt_1 dt_2\, \delta(t_1-t_2)\, \bar{g}^{-1}(t_1)\, e^{-i\omega(t_1+t_2)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle z^1 \mid z^1 \rangle_G &= \int dt_1 dt_2\, \bar{G}^{-1}\begin{pmatrix} t_1 & t_2 \\ \alpha_1 & \alpha_2 \end{pmatrix} \overline{z^1(t_1)}\, z^1(t_2) \\ &= \int dt_1 dt_2\, \bar{G}^{-1}\begin{pmatrix} t_1 & t_2 \\ \alpha_1 & \alpha_2 \end{pmatrix} z^2(t_1)\, z^1(t_2) \\ &= \frac{1}{2\omega}(i\omega)^{\alpha_1-1}(-i\omega)^{\alpha_2-1}\, \bar{g}^{-1}_{\alpha_1\alpha_2} \int dt_1 dt_2\, \delta(t_1-t_2)\, \bar{g}^{-1}(t_1)\, e^{i\omega(t_1-t_2)} \\ &= 1 \end{aligned}$$

Ebenso ergeben sich die Werte $\langle z^1 | z^2 \rangle_G = 0$ und $\langle z^2 | z^2 \rangle_G = 1$ für die restlichen Skalarprodukte, wobei die Eigenschaften von $\bar{G}^{(1)}_{\alpha_1\alpha_2}$ und $\bar{G}^{(1)}$ benutzt wurden. In der obigen Reihe verschwinden also alle Glieder mit $k \neq \ell$:

$$\langle N_{2m} \cdots N_{1\nu} \cdots \rangle$$

$$= \delta_{mm} \frac{1}{2^m m! m!} \int dt_1 \cdots dt_{2m} \bar{G}^{(1)}(t_1 t_2) \cdots \bar{G}^{(1)}(t_{2m-1} t_{2m}) \sum_{(\lambda_1 \cdots \lambda_{2m})} z^2(t_{\lambda_1}) \cdots z^2(t_{\lambda_m}) z^1(t_{\lambda_{m+1}}) \cdots z^1(t_{\lambda_{2m}})$$

Die übrigen Integrationen liefern den Wert 1, so daß man nur die genaue Anzahl dieser Integrationen prüfen muß. Ohne große Schwierigkeiten erhält man dafür

$$2^m \, m! \, m!$$

Der erste Faktor 2^m kommt durch die Symmetrie der Beziehungen zustande, die beiden anderen Faktoren resultieren durch Umstellungen innerhalb der z^1 bzw. z^2. Damit haben wir die Orthonormalität für den Spezialfall nachgewiesen. Durch vollständige Induktion läßt sich auch hier der allgemeine Fall behandeln, doch wollen wir wieder nur zwei einfache Beispiele vorführen, wobei wir lediglich die eben bewiesene Relation und die Gleichungen (2.14) heranziehen.

Beispiel 1: m = 0, m' = m, n = 1, n' = n

$$\langle N_{0m}(j_1|_2),\, N_{1m}(j_1|_2)\rangle$$

$$= \langle N_{0m},\, (\sqrt{m} - \tfrac{1}{\sqrt{m}}(j\,\partial_w F_j))\, N_{0,m-1}\rangle$$

$$= \sqrt{m}\,\langle N_{0m}, N_{0,m-1}\rangle - \tfrac{1}{\sqrt{m}}\Big\langle \tfrac{i\tilde{j}_1(\omega)+\omega\tilde{j}_2(\omega)}{\sqrt{2\omega}}\, N_{0m},\, \tfrac{i\tilde{j}_1(\omega)+\omega\tilde{j}_2(\omega)}{\sqrt{2\omega}}\, N_{0,m-1}\Big\rangle$$

$$= \sqrt{m}\;\delta_{m,m-1} - \tfrac{1}{\sqrt{m}}\sqrt{m+1}\cdot\sqrt{m}\cdot\delta_{m+1,m}$$

$$= \delta_{01}\,\delta_{mn}$$

Beispiel 2: m = 1, m' = m, n = 1, n' = n

$$\langle N_{1m}(j_1|_2),\, N_{1m}(j_1|_2)\rangle$$

$$= \langle (\sqrt{m} - \tfrac{1}{\sqrt{m}}(j\,\partial_w F_j))\, N_{0,m-1},\, (\sqrt{m} - \tfrac{1}{\sqrt{m}}(j\,\partial_w F_j))\, N_{0,m-1}\rangle$$

$$= \sqrt{m\cdot n}\;\delta_{m-1,m-1} - \left(\sqrt{\tfrac{m}{n}} + \sqrt{\tfrac{n}{m}}\right)\sqrt{m\,n}\;\delta_{mn} + \tfrac{\sqrt{m(m+1)}\,\sqrt{n(n+1)}}{\sqrt{m\cdot n}}\;\delta_{m+1,n+1}$$

$$= \delta_{11}\,\delta_{mn}$$

4.3 Entwicklung nach Funktionalsystemen

Durch den Satz von Nummer 4.2 ist die Existenz eines Orthonormalsystems im Funktionalraum gezeigt worden, - das der Energieeigenfunktionale des H.O.; wenn auch auf ein spezielles Skalarprodukt Bezug genommen wurde. Eine naheliegende Frage ist nun, ob das gefundene Orthonormalsystem im Funktionalraum auch vollständig oder wenigstens abgeschlossen ist, oder ob es mehrere solche Systeme gibt, die linear unabhängig sind.
Wir versuchen z. B. für den Anharmonischen Oszillator den folgenden Ansatz:

$$(4.10) \qquad T^{A.O.}_{mn}(j_1 j_2) = \sum_{k,\ell} C^{k\ell}_{mn}\, T^{H.O.}_{k\ell}(j_1 j_2)$$

haben aber sofort einen Widerspruch konstruiert, wenn wir (4.10) in die Translationsbedingung (3.12) einsetzen:

$$\sum_{k\ell} C^{k\ell}_{mn} \cdot (E_k - E_\ell)\, T_{k\ell}(j_1 j_2) = (E'_m - E'_n) \sum_{k,\ell} C^{k\ell}_{mn}\, T_{k\ell}(j_1 j_2)$$

(E' sind Energieeigenwerte des Anh.O.)

bzw.

$$\left((E_k - E_\ell) - (E'_m - E'_n)\right) C^{k\ell}_{mn} = 0 \qquad \text{für alle } k \text{ und } \ell$$

was natürlich unsinnig ist.
Man hat also allen Grund zu der Annahme, daß bereits jedes q.m.System mit diskreten Eigenwerten der Energie ein Orthogonalsystem von Funktionalen $T_{mn'}(j_1 j_2)$ erzeugt, das vom H.O. zumindest nicht linear abhängt.
Für die Lösung der Funktionalgleichungen, die in Kap. 3 aufgestellt wurden, mit numerischen Methoden ist es dennoch erforderlich, die

zeitgeordneten Funktionale $T_{ab}(j_1 j_2)$ nach bekannten Funktionalsystemen zu entwickeln und dann die Entwicklungskoeffizienten (i. a. Funktionen) mit geeigneten Verfahren näherungsweise zu bestimmen. Zu diesem Zweck haben schon ziemlich früh in der Entwicklung des Funktionalkalküls verschiedene Autoren (vgl. SCHULER/STUMPF [17]) Variationsansätze gemacht, von denen zwei eine besondere Rolle spielen:

a) Entwicklung nach Dyson-Funktionalen

Eine ausführliche Darstellung dieser Entwicklung bringen MAISON/STUMPF [11], SCHULER [15] und SCHEERER [14]; hier wollen wir kurz die Verhältnisse beim H.O. betrachten.
Die Dyson-Funktionale von k-ter Ordnung mit 2 k Parametern sind definiert durch:

(4.11)

$$\mathcal{D}_k\begin{pmatrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{pmatrix} j_1 j_2) := \frac{i^k}{k!}\, e^{-\frac{1}{2}(jQj)}\, j_{\alpha_1}(t_1) \cdots j_{\alpha_k}(t_k)$$

$$(jQj) := \int d\xi\, d\eta\; j_\sigma(\xi)\, Q\begin{pmatrix} \xi & \eta \\ \sigma & \tau \end{pmatrix} j_\tau(\eta)$$

Falls eine Entwicklung nach diesen Funktionalen möglich ist, schreiben wir:

(4.12)

$$T_{mn}(j_1 j_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \int dt_1 \dots dt_k\; \varphi^k_{mn}\begin{pmatrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{pmatrix} \mathcal{D}_k\begin{pmatrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{pmatrix} j_1 j_2)$$

Unter der Annahme, daß die Entwicklungsfunktionen φ^k_{mn} in allen Argumenten symmetrisch sind, folgt leicht durch Koeffizientenvergleich eine Beziehung zwischen den τ - und φ -Funktionen:

(4.13)

$$\tau^{k}_{mn}\left(\begin{matrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{matrix}\right) = \sum_{(\lambda_1 \dots \lambda_k)} \sum_{r=0}^{\left[\frac{k}{2}\right]} \frac{1}{2^r r!\,(k-2r)!}\, Q\left(\begin{matrix} t_{\lambda_1} t_{\lambda_2} \\ \alpha_{\lambda_1} \alpha_{\lambda_2} \end{matrix}\right) \cdots Q\left(\begin{matrix} t_{\lambda_{2r-1}} t_{\lambda_{2r}} \\ \alpha_{\lambda_{2r-1}} \alpha_{\lambda_{2r}} \end{matrix}\right) \varphi^{k-2r}_{mn}\left(\begin{matrix} t_{\lambda_{2r+1}} \dots t_{\lambda_k} \\ \alpha_{\lambda_{2r+1}} \dots \alpha_{\lambda_k} \end{matrix}\right)$$

Das bedeutet, daß diese Entwicklung für jedes anständige Q möglich ist, solange nur die Volterra-Reihe für $\overline{T}_{mn}(\dots)$ konvergiert. Setzen wir insbesondere $Q\left(\begin{matrix} t_1 t_2 \\ \alpha_1 \alpha_2 \end{matrix}\right) = F\left(\begin{matrix} t_1 t_2 \\ \alpha_1 \alpha_2 \end{matrix}\right)$, d.h. gleich der Zweipunktfunktion, so stellt sich (4.13) als Wickregel heraus:

$$\varphi^{k}_{mn}\left(\begin{matrix} t_1 \dots t_k \\ \alpha_1 \dots \alpha_k \end{matrix}\right) \rightarrow \varrho^{k}_{mn}\left(\begin{matrix} t_1 \dots t_k \\ \nu_1 \dots \nu_k \end{matrix}\right)$$

Leider stellen sich die Dysonfunktionale auch nicht als sehr praktikabel heraus, wenn man ein Skalarprodukt einführen will, deswegen ist günstiger die

b) Entwicklung nach gewichteten Hermite-Funktionalen

Die "gewichteten Hermitefunktionale" hat STUMPF [22] als Verallgemeinerung der schon von FRIEDRICHS [7], MAISON [10], SCHULER/STUMPF [18], SCHULER [15], MÄRTL [9] benutzten "einfachen Hermitefunktionale" eingeführt. Das war nötig geworden, weil die Umrechnung von den τ-Funktionen auf die Entwicklungsfunktionen der einfachen Hermitefunktionale nicht möglich ist. Eine allgemeine, sofort auch für die Feldtheorie anwendbare Definition findet man in STUMPF [22]. Wir wollen auf den H.O. etwas näher eingehen.
Für unsere Zwecke reicht folgende Definition der gewichteten Hermitefunktionale aus:

(4.14)

$$\mathcal{J}_k\left(\begin{matrix} t_1 \cdots t_k \\ \alpha_1 \cdots \alpha_k \end{matrix} j_1 j_2\right) := \frac{1}{\sqrt{n!}} A^+\left(\begin{matrix} t \\ \alpha_1 \end{matrix}\right) \cdots A^+\left(\begin{matrix} t \\ \alpha_k \end{matrix}\right) e^{-\frac{1}{2}(j a j)}$$

mit

$$A^+\left(\begin{matrix} t \\ \alpha \end{matrix}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\int d\xi\, j_1(\xi)\, a\left(\begin{matrix} t & \xi \\ \alpha & \end{matrix}\right) - \frac{\delta}{\delta j_\alpha(t)} \right)$$

Dabei ist $a\left(\begin{matrix} t_1 t_2 \\ \alpha_1 \alpha_2 \end{matrix}\right)$ eine (reelle) symmetrische Matrix (die Gewichtsfunktion) und (ja) die zugehörige quadratische Form.
Hier machen wir einen Variationsansatz für das N-Funktional:

(4.15)

$$N_{mn}(j_1 j_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \int dt_1 \cdots dt_k\; \eta^k_{mn}\left(\begin{matrix} t_1 \cdots t_k \\ \alpha_1 \cdots \alpha_k \end{matrix}\right) \mathcal{J}_k\left(\begin{matrix} t_1 \cdots t_k \\ \alpha_1 \cdots \alpha_k \end{matrix} j_1 j_2\right)$$

mit vollständig symmetrischen η-Funktionen. Wir geben weiterhin die Umrechnungsformel von den ϱ- auf die η-Funktionen an, ohne auf ihre zwar keineswegs schwierige aber doch sehr mühselige Ableitung einzugehen, in einer Form, die eine Diskussion beim H.O. ermöglicht.

(4.16)

$$\eta^n\left(\begin{matrix} t_1 \cdots t_n \\ \alpha_1 \cdots \alpha_n \end{matrix}\right) =$$

$$= \sqrt{n!}\, 2^{-\frac{n}{2}} \sum_{(\lambda_1 \cdots \lambda_n)} \sum_{r=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{1}{2^r r!\,(n-2r)!} \cdot a\left(\begin{matrix} t_{\lambda_1} t_{\lambda_2} \\ \alpha_{\lambda_1} \alpha_{\lambda_2} \end{matrix}\right) \cdots a\left(\begin{matrix} t_{\lambda_{2r-1}} t_{\lambda_{2r}} \\ \alpha_{\lambda_{2r-1}} \alpha_{\lambda_{2r}} \end{matrix}\right) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-)^s}{2^s s!} \int d\xi_1 \cdots d\xi_{n+2(s-r)} \times$$

$$\times\, \varrho^{n+2(s-r)}\left(\begin{matrix} \xi_1 \cdots \xi_{n+2(s-r)} \\ \xi_1 \cdots \xi_{n+2(s-r)} \end{matrix}\right) \cdot \bar{a}^{-1}\left(\begin{matrix} t_{\lambda_{2r+1}} \xi_1 \\ \alpha_{\lambda_{2r+1}} \xi_1 \end{matrix}\right) \cdots \bar{a}^{-1}\left(\begin{matrix} t_{\lambda_n} \xi_{n-2r} \\ \alpha_{\lambda_n} \xi_{n-2r} \end{matrix}\right) \bar{a}^{-1}\left(\begin{matrix} \xi_{n-2r+1} \xi_{n-2r+2} \\ \xi_{n-2r+1} \xi_{n-2r+2} \end{matrix}\right) \cdots \bar{a}^{-1}\left(\begin{matrix} \xi_{n+2(s-r)} \\ \xi_{n+2(s-r)} \end{matrix}\right)$$

Wählen wir für $a\binom{t_1 t_2}{\alpha_1 \alpha_2} = \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta(t_1 - t_2)$, also die Diagonalmatrix, so erhalten wir die Formeln für die einfachen Hermitefunktionale. Setzt man die aus Kap. 2 bekannten ϱ -Funktionen ein, so stellt man fest, daß die Umrechnung (4.16) nicht möglich ist, weil die Integrale auf der rechten Seite divergente Terme enthalten.

Beispiel:

$$\int dt_1 dt_2 \, \varrho_{0n}^2 \binom{t_1 t_2}{\alpha_1 \alpha_2} a\binom{t_1 t_2}{\alpha_1 \alpha_2}$$

$$= \int dt \, \varrho_{0n}^2 \binom{t\,t}{\alpha\,\alpha}$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{2} \int dt \, \sqrt{2}\, \delta_{2n} \frac{1}{2\omega} (-i\omega)^{2(\alpha-1)} e^{-2i\omega t}$$

$$= \sqrt{2}\, \delta_{2n} \frac{1-\omega^2}{2\omega} \int dt \, e^{-2i\omega t}$$

$$= \sqrt{2}\, \delta_{2n} \cdot \frac{1-\omega^2}{2\omega} \cdot \delta(2\omega)$$

Wählen wir dagegen $a\binom{t_1 t_2}{\alpha_1 \alpha_2} = G\binom{t_1 t_2}{\alpha_1 \alpha_2} = g_{\alpha_1 \alpha_2} g(t_1) \delta(t_1 - t_2)$ mit dem G aus der vorigen Nummer, dann erhalten wir Integrale wie im vorigen Abschnitt und daher ein endliches Resultat für die η -Funktionen, womit ihre Existenz gesichert ist.

Der unschätzbare Vorteil der Hermitefunktionale vor anderen Entwicklungssystemen ist die beinahe natürliche Art und Weise, wie man sie orthonormieren kann, vgl. STUMPF [22]:

(4.17)

$$\left\langle \mathcal{J}_k\left(\begin{matrix} t_{\alpha_1} \cdots t_{\alpha_k} \\ \alpha_1 \cdots \alpha_k \end{matrix} j_1 j_2\right), \mathcal{J}_\ell\left(\begin{matrix} t'_{\alpha'_1} \cdots t'_{\alpha'_\ell} \\ \alpha'_1 \cdots \alpha'_\ell \end{matrix} j_1 j_2\right) \right\rangle$$

$$= \int_{FS} \overline{\mathcal{J}_k}\, \mathcal{J}_\ell \, d_j$$

$$= \frac{1}{k!}\, \delta_{k\ell} \sum_{(\lambda_1 \cdots \lambda_k)} a\left(\begin{matrix} t_{\alpha_1} t_{\alpha_{\lambda_1}} \\ \alpha_1 \alpha_{\lambda_1} \end{matrix}\right) \cdots a\left(\begin{matrix} t_{\alpha_k} t_{\alpha_{\lambda_k}} \\ \alpha_k \alpha_{\lambda_k} \end{matrix}\right) \cdot \det U$$

Darin ist $\det U$ **die Determinante einer Transformation des Integranden auf einfachere Variable, sie kann in jedem Fall durch geeignete Renormierung eliminiert werden. Wenn aber die N-Funktionale nach den gewichteten Hermitefunktionalen entwickelbar sind, kann man auch über diesem Umweg ein Skalarprodukt im Funktionalraum einführen.**

Zusammenfassung und Ausblick

In unserer Arbeit verfolgen wir ein zweifaches Ziel: Einmal, den H.O. im Rahmen des Funktionalkalküls zu behandeln. Das geschieht in Kapitel 1 und 2, wo wir mit Hilfe der Wickregel die zeitgeordneten Funktionale des H.O. berechnen; aber auch in Kapitel 3 und 4, wo die Funktionalgleichungen des H.O. gelöst und die Normierbarkeit der Funktionale nachgewiesen werden. Zum zweiten wollen wir den Funktionalkalkül (wenigstens für die Q.M.) am Beispiel des H.O. darlegen und weiterentwickeln.

Dabei haben wir im besonderen zwei Schwerpunkte gesetzt. In Kapitel 3 werden funktionale Differential- und Integralgleichungen aufgestellt und verschiedene Lösungsmethoden erörtert. Es stellt sich beim H.O. heraus, daß die ursprünglichen Funktionalgleichungen praktisch eindeutig lösbar sind, während bei den symmetrisierten Gleichungen nicht alle Möglichkeiten die Eindeutigkeit der Lösungen gewährleisten. Auch die Einführung einer Feynman-Greenfunktion ist ein recht wirksamer Lösungsansatz (jedoch dürfen die Lösungen der homogenen Gleichung nicht vergessen werden). In Kapitel 4 versuchen wir durch Einführung eines Skalarproduktes zwischen den T-Funktionalen den Raum dieser Funktionale zu einem Hilbertraum (oder wenigstens einem nuklearen Raum mit einer Folge von Normen) zu machen.

Wesentlich für unsere Betrachtungen ist, daß sich die T-Funktionale in eine Volterra-Reihe entwickeln lassen. Durch geeignete Limitierungsverfahren kann man vermutlich in den meisten q.m. Fällen dieser Reihe einen Sinn geben. Die bessere Möglichkeit ist jedoch bereits in Abschnitt 2.3 für spezielle Quellfunktionen kurz diskutiert worden: Produktdarstellung der T-Funktionale. Sie gestattet nämlich, wie die jüngsten Er-

gebnisse zeigen, eine Formulierung des Funktionalkalküls auch ohne Bezugnahme auf die Volterra-Reihe, vgl. SOHR [21].
Es sei uns an dieser Stelle erlaubt, einen kurzen Ausblick auf das schon z. T. in Angriff genommene weitere Programm für den Funktionalkalkül zu tun:

1. Um den Funktionalraum kennenzulernen, verschafft man sich weitere exakte oder nahezu exakte Lösungen von Funktionalgleichungen der Q.M. und stellt eine Verbindung zur Störungstheorie her (Anharmonischer Oszillator, DAMMEIER [3]).

2. Die numerische Behandlung von Funktionalgleichungen der Q.M. durch Variationsansätze und die Methode der kleinsten Quadrate (bzw. ähnliche Verfahren) soll zunächst zeigen, daß man von der Schrödingergleichung unabhängig ist, und dann solche Verfahren bereitstellen, die auch in der Spinortheorie anwendbar sind.

3. Der mathematische Formalismus muß soweit geklärt werden, daß man den Hilbertraum der Q.M. wirklich in den Funktionalraum einbetten kann (SOHR [21]).

4. Zur formalen Streutheorie unter Verwendung der hier dargelegten Norm des H.O. gibt es bereits Arbeiten von STUMPF [23, 24] .

5. Das erklärte Ziel ist natürlich die Feldtheorie und hier vor allem die nichtlineare Spinortheorie mit nichtkanonischer Quantisierung, die hoffentlich eine einheitliche Theorie der Elementarteilchen liefert (HEISENBERG [8], DÜRR/WAGNER [5], STUMPF [25]).

Literaturverzeichnis

[1] Berezin, F.A. -The Method of Second Quantization, New York (1966)

[2] Dammeier, K. - Interner Bericht des Inst. f. Theor. Physik, Tübingen (1968)

[3] Dammeier, K. - Dissertation, München (1969)

[4] Dirac, P.A.M. - The Principles of Quantum Mechanics, Oxford (1962)

[5] Dürr, H.P. u. Wagner, F. - Nonlinear Theory with Hermitean Spinor Field Operators, Nuovo Cim. 46, 223 (1969)

[6] Friedrichs, K.O. - Mathematical Aspects of the Quantum Theory of Fields, New York (1953)

[7] Friedrichs, K.O. u. Shapiro, H.N. -Seminar: Integration of Functionals, New York Univ., Inst. of Math. Sci. (1957)

[8] Heisenberg, W. - Einführung in die einheitliche Feldtheorie der Elementarteilchen, Stuttgart (1967)

[9] Märtl, H.G. - Zur gruppenth. Ausred. niederer Näherungen i.d. funktionalen Nichtlin. Spinortheorie, Dissertation, Tübingen (1969)

[10] Maison, D. - Ein Approximationsverfahren für die Feldtheorie in funktionaler Formulierung, Dissertation, München (1967)

[11] Maison, D. u. Stumpf, H. - On the Field Theoretic Functional Calculus for the Anharmonic Oscillator I, Z. Naturforsch. 21a, 1829 (1966)

[11a] Mitter, H. - Zur Theorie nichtlinearer Spinorfelder, Z. Naturforsch. 20a, 1505 (1965)

[11b] Mitter, H. - Nonlinear spinortheory in terms of vacuum expectation values, Acta Phys. Austr. Suppl. III, 42 (1966)

[12] Novozhilov, J.V. u. Tulub, A.V. - The Method of Functionals in Quantum Field Theory, New York (1961)

[13] Rampacher, H. u. Stumpf H. u. Wagner, F. - Grundlagen der Dynamik in der Nichtlinearen Spinortheorie der Elementarteilchen, Fortschr. d. Physik 13, 385 (1965)

[14] Scheerer, K. - Bemerkungen zum Funktionalkalkül am Beispiel des Anharmonischen Oszillators, Diplomarbeit, Tübingen (1969)

[15] Schuler, W. - Field Theoretic Functional Calculus for the Anharmonic Oscillator in Low Approximations, Z. Naturforsch. 23a, 1869 (1968)

[16] Schuler, W. - On the Existence Problem of Functional Quantum Theory, Interner Bericht des Inst. f. Theor. Phys., Tübingen (1969)

[17] Schuler, W. u. Stumpf, H. - On the Field Theoretic Functional Calculus for the Anharmonic Oscillator II, Z. Naturforsch. 22a, 1842 (1967)

[18] Schuler, W. u. Stumpf, H. - On the Field Theoretic Functional Calculus for the Anharmonic Oscillator III, Z. Naturforsch. 23a, 902 (1968)

[19] Schwinger, J. - On the Green's Function of Quantized Field I, II, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 37, 452 (1951)

[20] Sohr, H. - Interner Bericht des Inst. f. Theor. Physik, Tübingen (1968)

[21] Sohr, H. - Mathematische Grundlagen der Theorie quantenmechanischer Funktionale, erscheint demnächst

[22] Stumpf, H. - On the Quantum Theory of the Anharmonic Oscillator in Functional Space, Z. Naturforsch. 24a, 188 (1969)

[23] Stumpf, H. - Functional Quantum Theory of Scattering Processes I, Z. Naturforsch. 24a, 1022 (1969)

[24] Stumpf, H.-Functional Quantum Theory of Scattering Processes II, Interner Bericht des Inst. f. Theor. Phys., Tübingen (1969)

[25] Stumpf, H. - Noncanonical Relativistic Heisenberg Quantization in Functional Space, Interner Bericht des Inst. f. Theor. Physik, Tübingen (1969)

[26] Stumpf, H. u. Wagner, F. u. Wahl F. - Zur Konvergenz der einzeitigen NTD-Methode beim Anharmonischen Oszillator, Z. Naturforsch. 19a, 1254 (1964)

[27] Symanzik, K. - Über das Schwingersche Funktional in der Feldtheorie, Z. Naturforsch. 9a, 809 (1954)

[28] Wagner, F. - Zur Konvergenz der einzeitigen NTD-Methode beim Anharmonischen Oszillator, Dissertation, München (1966)

Mein Lebenslauf

1940 Geburt

Am 15. 2. 1940 wurde ich in Berlin-Köpenick als Sohn des Ministerialdirektors Dr. Friedrich Weber und seiner Frau Maria Weber geb. Proebsting geboren.

1946-1959 Schulzeit

Vier Jahre besuchte ich die Volksschule in Ramsau (Kreis Wasserburg)/Bayern, worauf neun Schuljahre am altsprachlichen Theresien-Gymnasium in München und das Abitur am 15. 7. 1959 folgten. Mein Vater starb am 19. 7. 1955 in München.

1959-1966 Studium

Mit dem WS 1959/60 begann ich an der Universität München das Studium der Physik und bestand dort das Vordiplom am 17. 7. 1962. Erst im SS 1964 wurde mir eine Diplomarbeit zugeteilt, deren Thema Prof. Dr. R. Lüst vom Institut für Extraterrestrische Physik in München-Garching stellte: "Untersuchungen zum Solaren Wind an einem Modell mit azimutaler Geschwindigkeitskomponente." Am 12. 12. 1966 bestand ich die Diplomprüfung.

1967-1969 Fortbildung

Im Frühjahr 1967 war ich vorübergehend wissenschaftlicher Angestellter an der Sternwarte München, wo ich an Rechenprogrammen mitarbeitete. Von Mai 1967 bis Februar 1970 war ich Doktorand bei Prof. Dr. H. Stumpf an der Universität Tübingen. Seit dem 22. 6. 1968 bin ich mit der Ärztin Christa Weber geb. Hartmann aus Herrenberg/Württemberg verheiratet. Am 1. 7. 1969 kam unsere Tochter Heidemarie zur Welt.

Herrn Prof. Dr. H. Stumpf danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und den ständigen Gedankenaustausch über das Thema.
Für wertvolle Diskussionen bin ich außerdem den Herren Dr. H. Sohr und Dr. W. Schuler verpflichtet.